


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wstęp do modelowania molekularnego		13.3.0609	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Organicznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr Rafał Ślusarz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 15 godz.	
zajęcia on-line, zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 15 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2023/2024 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Analiza zdarzeń krytycznych (przypadków) - Dyskusja - Projektowanie doświadczeń - Wykonywanie doświadczeń - Wykład problemowy - Wykład z prezentacją multimedialną - ćwiczenia w pracowni informatycznej (stacjonarne) oraz praca własna przy komputerze (on-line) 		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru	
		Podstawowe kryteria oceny	
		<p>WYKŁAD: oceny cząstkowe wystawiane są na podstawie wyników quizów organizowanych w Portalu Edukacyjnym UG: testów jedno- i wielokrotnego wyboru, pytań zamkniętych, pytań z krótką odpowiedzią, pytań typu „prawda czy fałsz” i „dopasowywanie odpowiedzi”. Ocena zaliczeniowa jest średnią arytmetyczną ocen cząstkowych.</p> <p>ĆWICZENIA LAB.: oceny cząstkowe wystawiane są na podstawie ocen sprawozdań, rozwiązań praktycznych zadań problemowych, projektów lub prezentacji lub otwartych odpowiedzi na postawione problemy. Ocena zaliczeniowa jest średnią arytmetyczną ocen cząstkowych.</p>	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student rozwiązuje testy związane z metodami obliczeniowymi (K_W08); w testach wybiera programy i algorytmy obliczeniowe do rozwiązania postawionego problemu (K_W09).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia w adekwatnych do postawionego problemu programach obliczeniowych (K_U05); poprawnie rozwiązuje postawione problemy wykorzystując umiejętności zdobyte poza wykładem i przepisami do ćwiczeń (K_U09).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

Technologia Informatyczna, Informatyka lub kurs zbliżony tematycznie

B. Wymagania wstępne

Wymagana jest znajomość języka angielskiego w stopniu co najmniej podstawowym oraz ogólne zrozumienie budowy związków chemicznych.

Cele kształcenia

Wprowadzenie studenta do tematyki modelowania molekularnego.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

Zarys zasad tworzenia i reprezentacji struktur chemicznych; konwencje i stosowane na przestrzeni historii metody wizualizacji i symulacji związków chemicznych.

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

Przygotowywanie reprezentacji dwu- i trójwymiarowych struktur związków chemicznych; proste symulacje komputerowe dynamiki i optymalizacji geometrii układów.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

brak (stosowane są źródła on-line)

B. Literatura uzupełniająca

-

Kierunkowe efekty uczenia się

K_W08: wykazuje się znajomością metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki

K_W09: opisuje w zaawansowanym stopniu praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych

K_U05: stosuje metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych

K_U09: umie uczyć się samodzielnie

Wiedza

Student nazywa metody projekcji oraz definiuje zakres przekazywanych informacji w każdej z reprezentacji molekularnych, wyjaśnia różnice pomiędzy widzeniem prostym i krzyżowym, ilustruje korzyści płynące z zastosowania wybranych metod prezentacji

Umiejętności

Student rozpoznaje typy reprezentacji graficznych dowolnych związków chemicznych, klasyfikuje typy reprezentacji; ocenia ich przydatność w prezentacji wyników, proponuje najlepsze metody wizualizacji związków chemicznych, wykazuje kreatywność w przygotowywaniu prezentacji chemicznych.

Kompetencje społeczne (postawy)

Student rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, krytycznie podchodzi do spotykanych zestawień i dyskusji wyników, samodzielnie planuje najbardziej korzystne możliwości przedstawiania zagadnień strukturalnych.

Kontakt

rafal.slusarz@ug.edu.pl