

**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Modelowanie molekularne		13.3.0441	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Teoretycznej			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia obliczeniowa
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Cezary Czaplowski; dr hab. Artur Gieldoń; prof. dr hab. Józef Liwo; dr Magdalena Ślusarz			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		7	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 45 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 15 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 115 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 175 godz. - 7 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2021/2022 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
- Wykonywanie doświadczeń		<b>Sposób zaliczenia</b>	
- Wykład z prezentacją multimedialną		- Zaliczenie na ocenę	
		- Egzamin	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		- egzamin pisemny testowy	
		- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		Ćwiczenia laboratoryjne: średnia arytmetyczna ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru za pisemne sprawozdania z wykonanych ćwiczeń laboratoryjnych, głównym kryterium oceny sprawozdań są prawidłowe odpowiedzi na pytania zawarte w instrukcji do ćwiczeń. Wykłady: zdanie egzaminu testowego ze znajomości zagadnień poruszanych na wykładzie (50% lub więcej maksymalnej liczby punktów).	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Poziom przyswojenia wiedzy przez studenta jest weryfikowany na egzaminie zaliczającym przedmiot (K_W05, K_W07)			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Nabycie przez studenta umiejętności jest weryfikowane w czasie egzaminu zaliczającego przedmiot oraz poprzez obserwację na zajęciach (K_U01, K_U02, K_U04)			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Ocena aktywności studenta na zajęciach i konsultacjach, podejmowania dyskusji, samodzielności i pracy w grupie. (K_K01)			

<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>	
<b>A. Wymagania formalne</b> Technologia Informatyczna, Chemia teoretyczna	
<b>B. Wymagania wstępne</b> umiejętność pracy w systemie Unix, umiejętność opisu geometrii cząsteczek chemicznych, znajomość podstaw mechaniki statystycznej	
<b>Cele kształcenia</b> Praktyczne zapoznanie studentów z technikami i narzędziami chemii obliczeniowej wykorzystywanymi w modelowaniu molekularnym. Przygotowanie studentów do wyboru właściwych metod chemii obliczeniowej w zależności od badanego układu.	
<b>Treści programowe</b> Wizualizacja cząsteczek chemicznych. Mechanika molekularna, określanie struktury oraz zmian konformacyjnych cząsteczek chemicznych. Empiryczne pola siłowych i ich zastosowanie w analizie konformacyjnej. Zastosowanie metod ab initio i półempirycznych. Bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach ab initio. Orbitale kanoniczne i zlokalizowane. Granice dokładności przybliżenia jednoelektronowego, energia korelacji elektronowej. Metody wychodzące poza przybliżenie jednoelektronowe. Błąd superpozycji bazy (BSSE) w obliczeniach energii oddziaływań międzycząsteczkowych. Termodynamika i kinetyka reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej. Podstawy metod symulacji komputerowych: Monte Carlo i dynamika molekularna. Parametryzacja empirycznych pól siłowych stosowanych w mechanice i dynamice molekularnej. Modelowanie makrocząsteczek - DNA, RNA, białka.	
<b>Wykaz literatury</b> Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, Heermann Dieter W., WNT 1997 Rozdział 13. Komputery w chemii medycznej z Chemia medyczna. Podstawowe zagadnienia, Graham Baker, Graham L. Patrick, WNT 2003	
<b>Kierunkowe efekty kształcenia</b>  K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności; K_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności; K_U01: planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o średnim stopniu złożoności; K_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy; K_U04: stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych; K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	<b>Wiedza</b>  Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego oraz podstawowe bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach ab initio. Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych. Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w metodach chemii kwantowej oraz empiryczne pola siłowe. Rozróżnia orbitale naturalne i zlokalizowane. Definiuje błąd superpozycji bazy.
	<b>Umiejętności</b>  Student klasyfikuje metody modelowania molekularnego służące do określenia struktury, charakterystyk spektralnych, właściwości związków chemicznych w różnych stanach skupienia i wybiera odpowiednią metodę chemii obliczeniowej do wspomnienia pracy eksperymentalnej. Prowadzi obliczenia i symulacje komputerowe w wybranych programach chemii obliczeniowej, analizuje wyniki symulacji komputerowych, porównuje wyniki obliczeń z wartościami eksperymentalnymi.
	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b>  Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego wnioskowania. Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na komputerach podłączonych do sieci. Wykazuje odpowiedzialność za konto osobiste w wielodostępnym systemie komputerowym oraz za bezpieczeństwo jego zasobów. Pracuje samodzielnie.
<b>Kontakt</b> cezary.czaplewski@ug.edu.pl	