

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

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Modelowanie molekularne		13.3.0566	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia
		specjalnościowy	obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Cezary Czapplewski; dr Rafał Ślusarz; dr hab. Artur Giełdoń; prof. dr hab. Józef Liwo; dr Magdalena Ślusarz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		2	
Ćw. laboratoryjne		zajęcia 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 15 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2020/2021 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
ćwiczenia w pracowni komputerowej		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Wykonanie projektu oraz przygotowanie i przedstawienie prezentacji.	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Student odpowiada w sprawozdaniu z ćwiczeń laboratoryjnych na pytania postawione w instrukcji do ćwiczeń dotyczące metod modelowania molekularnego (K_W05), algorytmów matematycznych wykorzystywanych w tych metodach (K_W06) oraz metod obliczeniowych i informatycznych (K_W08). W trakcie ćwiczeń laboratoryjnych student dobiera właściwe metody modelowania (K_W07). Podobnie, na pisemnym egzaminie testowym wielokrotnego wyboru.			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Student planuje i realizuje modelowanie molekularne dla układów zadanych w instrukcji do ćwiczeń laboratoryjnych (K_U01), w sprawozdaniu przedstawia krytycznie wyniki modelowania (K_U02) dyskutując ich zgodność z dostępnymi danymi eksperymentalnymi (K_U04).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
W toku rozwiązywania zadań weryfikowane są zdolności studenta do krytycznego myślenia oraz umiejętności wyszukiwania koniecznych materiałów. Poprzez realizowanie projektów zespołowych weryfikowana jest umiejętność współpracy i komunikatywność.(K_K01)			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			

<p>A. Wymagania formalne Technologia Informatyczna.</p> <p>B. Wymagania wstępne umiejętność pracy w systemie Unix</p>	
<p>Cele kształcenia</p> <p>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.</p>	
<p>Treści programowe</p> <p>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. Modelowanie reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej. Podstawy metod symulacji komputerowych: Monte Carlo i dynamika molekularna. Modelowanie makrocząsteczek - DNA, RNA, białka.</p>	
<p>Wykaz literatury</p> <p>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</p>	
<p>Kierunkowe efekty kształcenia</p> <p>K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności; K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności; K_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności; K_W08: wykazuje się znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii; 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;</p>	<p>Wiedza</p> <p>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.</p> <p>Umiejętności</p> <p>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 wspomoczenia pracy eksperymentalnej. Prowadzi obliczenia i symulacje komputerowe w wybranych programach chemii obliczeniowej, analizuje wyniki symulacji komputerowych, porównuje wyniki obliczeń z wartościami eksperymentalnymi.</p> <p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <p>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.</p>
<p>Kontakt</p> <p>cezary.czaplewski@ug.edu.pl</p>	