

**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>	
Przewidywanie zagrożenia chemicznego		13.3.0795	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		2	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 30 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje - 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 15 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 50 godz. - 2 pkt ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 15 godz., Wykład: 15 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2021/2022 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Wykład z prezentacją multimedialną</li> <li>- Ćwiczenia laboratoryjne: wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania</li> </ul>		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		Wykład:	
		zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi	
		Ćwiczenia laboratoryjne:	
		wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz	
		pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu	
		(sprawozdania)ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen	
		częstkowych.	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	

**Wykład:**

- Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych.
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
- Studenci, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na zaliczenie ustne. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
- Negatywna ocena z zaliczenia musi być poprawiona podczas zaliczenia poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

**Ćwiczenia laboratoryjne:**

- Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
- Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
- Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią arytmetyczną ocen otrzymanych ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.
- Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

**Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia**

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Podczas zaliczenia pisemnego student odpowiada na pytania testowe dotyczące elementów oceny ryzyka chemicznego, obowiązków prawnych w zakresie oceny ryzyka stwarzanego przez związki chemiczne, budowy modelu QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego (K\_W06, K\_W07); zastosowania metod QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego w procesie przewidywania zagrożenia chemicznego stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K\_W08) modeli komercyjnych dostępnych na rynku do przewidywania zagrożenia chemicznego (K\_W10).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Podczas zaliczeń pisemnych następuje ocena samodzielności przewidywania zagrożeń chemicznych dla nowego związku w oparciu o komercyjnie dostępne na rynku modele (K\_U01), umiejętności krytycznego weryfikowania uzyskanych rezultatów modelowania, prawidłowości prowadzonych dyskusji uzyskanych wyników odnosząc się do wcześniej zdobytej wiedzy z zakresu nauk chemicznych oraz pokrewnych dyscyplin naukowych (K\_U02, K\_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Ocena zachowania studenta pod kątem dostrzegania korzyści z wykorzystania metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego w kontekście społecznym i ekonomicznym (K\_K06); rozumienia potrzeby dalszego kształcenia się (K\_K01); wykazywania kreatywności w pracy w grupie (K\_K02).

**Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi****A. Wymagania formalne**

- chemia ogólna

**B. Wymagania wstępne**

- posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii,
- umiejętność obsługi komputera w zakresie podstawowym (kopiowanie plików i uruchamianie aplikacji w systemie operacyjnym Windows/Linux, arkusz kalkulacyjny).

**Cele kształcenia**

- Zaznajomienie studentów z problematyką oceny ryzyka stwarzanego przez substancje chemiczne (ze szczególnym uwzględnieniem komponentu oceny zagrożenia chemicznego), w kontekście zapisów europejskiego systemu REACH oraz wynikających z niego obowiązków prawnych w zakresie oceny ryzyka chemicznego.
- Zaznajomienie studentów z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania komputerowych metod przewidywania zagrożenia chemicznego

rekomendowanych w rozporządzeniu REACH.

- Zapoznanie studentów z metodologią QSAR, analizy trendu i read-across oraz ich współczesnymi wyzwaniem.
- Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte do przewidywania zagrożenia chemicznego.

### Treści programowe

#### A. Problematyka wykładu:

Podstawowe założenia oceny ryzyka stwarzanego przez związki chemiczne ze szczególnym uwzględnieniem komponentu oceny zagrożenia chemicznego.

Źródła związków chemicznych stwarzających zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska naturalnego oraz przegląd najważniejszych substancji uznanych za niebezpieczne; związki chemiczne określane akronimami PBT oraz vPvB.

Właściwości fizykochemiczne mające kluczowe znaczenie dla oceny zagrożenia chemicznego.

Pojęcie (eko)toksyczności i rodzaje efektów toksycznych.

Krajowe oraz międzynarodowe strategie i regulacje prawne w zakresie oceny ryzyka chemicznego ze szczególnym uwzględnieniem aspektu oceny zagrożenia chemicznego (m. in. Rozporządzenie REACH).

Idea metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego rekomendowanych w rozporządzeniu REACH (w tym metod: QSAR, analizy trendu oraz szacowania przekrojowego).

Etapy budowy modeli komputerowych wykorzystywanych do przewidywania zagrożenia chemicznego.

Wiarygodność metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego.

Wady i zalety metod QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego oraz ich użyteczność w procesie przewidywania zagrożenia chemicznego stwarzanego przez nowe związki chemiczne.

#### B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

Podstawowe techniki w modelowaniu QSAR, analizie trendu i szacowania przekrojowego.

Przegląd komercyjnie dostępnych modeli komputerowych wykorzystywanych do przewidywania zagrożenia chemicznego (w tym: OECD QSAR Toolbox, Toxtree, EPISuite, ECOSAR, VEGA, QsarDB).

Kryteria jakości stawiane modelom komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego zdefiniowane w rozporządzeniu REACH oraz w regulacjach prawnych innych państw (Japonia, USA).

Metody weryfikacji wiarygodności wyników uzyskiwanych za pomocą metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego.

### Wykaz literatury

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

##### A.1. wykorzystywana podczas zajęć

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzącego zajęcia.

T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin: Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications. Springer 2010. ISBN: 978-1-4020-9782-9.  
Rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 Parlamentu Europejskiego i Rady z dnia 18 grudnia 2006 r. w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH) i utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów, zmieniające dyrektywę 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywę Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE.

##### A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

K. Roy, S. Kar, R. Das Narayan: A Primer on QSAR/QSPR Modeling - Fundamental Concepts. Springer 2015. ISBN: 978-3-319-17281-1.

T. Puzyn, A. Mostrąg-Szlichtyng, N. Suzuki, M. Haranczyk. Metody chemometryczne w ocenie ryzyka: ilościowe zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami (QSPR) dla nowych rodzajów zanieczyszczeń chemicznych. W: Zuba D., Parczewski A. (Eds.): Chemometria w nauce i praktyce. Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, Kraków (2009). ISBN: 978-83-87425-38-8.

#### B. Literatura uzupełniająca:

S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009.

R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005

D. Zuba, A. Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008.

JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004.

### Kierunkowe efekty kształcenia

K\_W06 - stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności;

K\_W08 - wykazuje się znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii;

K\_W11 - wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie;

K\_U02 - krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń

### Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. zna najważniejsze założenia oceny ryzyka stwarzanego przez związki chemiczne;
2. rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne;
3. wskaże związki/grupy związków chemicznych stanowiących duże zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska przyrodniczego;
4. zna podstawy teoretyczne metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego (w tym metod: QSAR, analizy trendu oraz szacowania przekrojowego);
5. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modeli: QSAR, analizy

<p>teoretycznych, a także dyskutuje błędy;</p> <p>K_U04 - stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych;</p> <p>K_U05 - prezentuje wyniki badań w postaci samodzielnie zredagowanej pracy pisemnej, zawierającej opis i uzasadnienie celu pracy, przyjętą metodologię, wyniki oraz ich znaczenie na tle innych podobnych badań;</p> <p>K_K01 - zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;</p> <p>K_K02 - pracuje w zespole przyjmując w nim różne role;</p> <p>K_K05 - rozumie potrzebę samodzielnego wyszukiwania informacji w literaturze naukowej oraz czasopismach popularnonaukowych;</p> <p>K_K06 - w sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizacji zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.</p>	<p>trendu i szacowania przekrojowego;</p> <p>6. zna kryteria jakości jakie - zgodnie z wymogami rozporządzenia REACH - spełniać musi każdy model wykorzystywany w procesie komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego;</p> <p>7. wymieni główne wyzwania stojące przed metodami komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego;</p> <p>8. zna przykłady modeli komercyjnie dostępnych na rynku do przewidywania zagrożenia chemicznego.</p>
	<p><b>Umiejętności</b></p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. potrafi samodzielnie wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie komercyjnie dostępnych na rynku modeli do przewidywania zagrożenia chemicznego;</li> <li>2. krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.</li> </ol>
	<p><b>Kompetencje społeczne (postawy)</b></p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. dostrzega korzyści z wykorzystania metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa), etycznym (ograniczenie wykorzystania zwierząt laboratoryjnych) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);</li> <li>2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;</li> <li>3. wykazuje kreatywność w pracy grupie;</li> <li>4. wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.</li> </ol>
<p><b>Kontakt</b></p> <p>agnieszka.gajewicz@ug.edu.pl , tel. 58 523 5246</p>	