

**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		13.3.0441	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia obliczeniowa
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski; dr Magdalena Ślusarz; dr Artur Giełdoń; prof. dr hab. Józef Liwo			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		7	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 15 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 115 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 175 godz. - 7 ECTS	
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykonywanie doświadczeń		Sposób zaliczenia	
- Wykład z prezentacją multimedialną		- Zaliczenie na ocenę	
		- Egzamin	
		Formy zaliczenia	
		- egzamin pisemny testowy	
		- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru	
		Podstawowe kryteria oceny	
		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).	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			

Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:

Student poprawnie 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

A. Wymagania formalne

Technologia Informatyczna, Chemia teoretyczna

B. Wymagania wstępne

umiejętność pracy w systemie Unix, umiejętność opisu geometrii cząsteczek chemicznych, znajomość podstaw mechaniki statystycznej

Cele kształcenia

Praktyczne zapoznanie studentów z technikami i narzędziami chemii obliczeniowej wykorzystywanymi w modelowania molekularnym.
Przygotowanie studentów do wyboru właściwych metod chemii obliczeniowej w zależności od badanego układu.

Treści programowe

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.

Wykaz literatury

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

Efekty kształcenia

(obszarowe i kierunkowe)

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

Wiedza

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.

Umiejętności

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.

Kompetencje społeczne (postawy)

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.

konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	
Kontakt cezary.czaplewski@ug.edu.pl	