


**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY


|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| Nazwa przedmiotu                                                                                                                                                                                                                                                                |          | Kod ECTS                                                                                                                                                                                                                                |                  |
| Przewidywanie zagrożenia chemicznego                                                                                                                                                                                                                                            |          | 13.3.0795                                                                                                                                                                                                                               |                  |
| Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot                                                                                                                                                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| null                                                                                                                                                                                                                                                                            |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| Studia                                                                                                                                                                                                                                                                          |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| wydział                                                                                                                                                                                                                                                                         | kierunek | poziom                                                                                                                                                                                                                                  | drugiego stopnia |
| Wydział Chemii                                                                                                                                                                                                                                                                  | Chemia   | forma                                                                                                                                                                                                                                   | stacjonarne      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | moduł                                                                                                                                                                                                                                   | wszystkie        |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | specjalnościowy                                                                                                                                                                                                                         | wszystkie        |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | specjalizacja                                                                                                                                                                                                                           | wszystkie        |
| Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)                                                                                                                                                                                                                                  |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| dr Agnieszka Gajewicz                                                                                                                                                                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin                                                                                                                                                                                                                |          | Liczba punktów ECTS                                                                                                                                                                                                                     |                  |
| Formy zajęć                                                                                                                                                                                                                                                                     |          | 2                                                                                                                                                                                                                                       |                  |
| Wykład, 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 pkt ECTS                                                                                                                                                                                                            |                  |
| Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 15 godz.                                                                                                                                                                                                                                   |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| Cykl dydaktyczny                                                                                                                                                                                                                                                                |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| 2019/2020 zimowy                                                                                                                                                                                                                                                                |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| Status przedmiotu                                                                                                                                                                                                                                                               |          | Język wykładowy                                                                                                                                                                                                                         |                  |
| fakultatywny (do wyboru)                                                                                                                                                                                                                                                        |          | polski                                                                                                                                                                                                                                  |                  |
| Metody dydaktyczne                                                                                                                                                                                                                                                              |          | Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne                                                                                                                                                    |                  |
| <div>- Wykład z prezentacją multimedialną</div> <div>- 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</div> |          | Sposób zaliczenia                                                                                                                                                                                                                       |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | Zaliczenie na ocenę                                                                                                                                                                                                                     |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | Formy zaliczenia                                                                                                                                                                                                                        |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | Wykład:<br>zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi                                                                                                                                                                                     |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | Ćwiczenia laboratoryjne:<br>wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz<br>pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu<br>(sprawozdania)ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen<br>częstkowych. |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          | Podstawowe kryteria oceny                                                                                                                                                                                                               |                  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          |                                                                                                                                                                                                                                         |                  |

**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:

Student wie jakie są elementy oceny ryzyka chemicznego, zna obowiązki prawne w zakresie oceny ryzyka stwarzanego przez związki chemiczne oraz wie jak zbudować i prawidłowo ocenić model QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego (K\_W06, K\_W07); prawidłowo wskaże zastosowania metod QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego w procesie przewidywania zagrożenia chemicznego stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K\_W08) zna przykłady modeli komercyjnie dostępnych na rynku do przewidywania zagrożenia chemicznego (K\_W10).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student potrafi samodzielnie przewidzieć zagrożenie chemiczne dla nowego związku w oparciu o komercyjnie dostępne na rynku modele (K\_U01), krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania, prawidłowo prowadzi dyskusję 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:

Student dostrzega korzyści z wykorzystania metod komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego w kontekście społecznym i ekonomicznym (K\_K06); rozumie potrzebę dalszego kształcenia się (K\_K01); wykazuje kreatywność 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 wyzwaniami.

- 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. Leszczyński, 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 analizie: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008.

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

### Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

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 teoretycznych, a także dyskutuje błędy;

### 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 trendu i szacowania przekrojowego;
6. zna kryteria jakości jakie - zgodnie z wymogami rozporządzenia REACH -

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <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>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>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |