

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

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wykład monograficzny - Oprogramowanie w chemii obliczeniowej		13.3.0443	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia i
		specjalnościowy	technologia środowiska, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski; prof. dr hab. Józef Liwo			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 40 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2019/2020 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		Podstawowe kryteria oceny	
		poprawność merytoryczna i atrakcyjność prezentacji wybranego programu z zakresu chemii obliczeniowej	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Student przedstawia prezentację o wybranej metodzie chemii obliczeniowej wykraczając poza kanoniczny kurs chemii (K_W05) a jednocześnie odnosi się do aktualnie dostępnego oprogramowania realizującego tą metodę w praktyce i najnowszych jej zastosowań. (K_W11)			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
W toku przygotowania i przedstawienia przez studenta prezentacji weryfikowane są zdolności studenta do krytycznego myślenia oraz umiejętności wyszukiwania koniecznych materiałów. (K_K01)			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
Technologia informacyjna, Chemia kwantowa, Chemia teoretyczna			
B. Wymagania wstępne			
umiejętność pracy w systemie Unix, podstawy chemii kwantowej, posługiwanie się terminologią i nomenklaturą dotyczącą chemii kwantowej, umiejętność opisu geometrii cząsteczek związków chemicznych, podstawy mechaniki statystycznej i mechaniki molekularnej			
Cele kształcenia			

Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej.	
Treści programowe	
<p>Posługiwanie się językami powłok systemu UNIX. Edytor strumieniowy sed i program awk oraz ich zastosowanie do obróbki wyników otrzymanych z programów obliczeniowych. Uruchamianie zadań w centrach obliczeniowych. Systemy kolejowania: PBS, LSF i NQS. Oprogramowanie metod ab initio i półempirycznych chemii kwantowej: pakiety GAMESS, GAUSSIAN, MOPAC, MOLPRO, TURBOMOLE. Oprogramowanie mechaniki i dynamiki molekularnej: pakiety AMBER, GROMACS, TINKER, NAMD, ECEPPAK. Przeglądarki i edytory molekularne: Avogadro, Molden, MolMol, RasMol, Pymol, VMD, Chimera, Sirius. Baza CSDS struktur krystalograficznych małych molekuł i baza PDB struktur biomolekuł oraz korzystanie z nich.</p>	
Wykaz literatury	
brak	
Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)	Wiedza
	Umiejętności
	Kompetencje społeczne (postawy)
<p>K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;</p> <p>K_W11: wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie;</p> <p>K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;</p>	<p>Student rozpoznaje i charakteryzuje dostępne oprogramowanie do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej. Rozróżnia programy do obliczeń z zakresu chemii kwantowej od programów stosujących metody mechaniki molekularnej.</p> <p>Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na superkomputerach w centrach obliczeniowych.</p>
Kontakt	
cezary.czaplewski@ug.edu.pl	