



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt 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			
Katedra Chemii Teoretycznej			
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 zajęcia 45 godz. konsultacje 15 godz. praca własna studenta 115 godz. RAZEM: 175 godz. - 7 ECTS
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2020/2021 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykonywanie doświadczeń - Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
		- 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 przyswojenia wiedzy:			
Poziom przyswojenia wiedzy przez studenta jset weryfikowany na egzaminie zaliczającym przedmiot (K_W05, K_W07)			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Nabycie przez studenta umiejętności jest weryfikowane w czasie egzaminu zaliczającego przedmiot oraz poprzez obserwację na zajęciach (K_U01, K_U02, K_U04)			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Ocena aktywności studenta na zajęciach i konsultacjach, podejmowania dyskusji, samodzielności i pracy w grupie. (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 modelowaniu 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

Kierunkowe efekty kształcenia

K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;

K_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności;

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;

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.

Kontakt

cezary.czaplewski@ug.edu.pl