



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			13.3.1066	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot				
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska				
Studia				
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia	
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	stacjonarne	
		moduł	wszystkie	
		specjalnościowy	wszystkie	
		specjalizacja	wszystkie	
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)				
dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna				
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.				
Termin realizacji przedmiotu				
2020/2021 zimowy				
Status przedmiotu		Język wykładowy		
fakultatywny (do wyboru)		polski		
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
- Wykład z prezentacją multimedialną - 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		Sposób zaliczenia		
		Zaliczenie na ocenę		
		Formy zaliczenia		
		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 cząstkowych.		
		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:

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_BChII_W06, K_BChII_W07); zastosowania metod QSAR, analizy trendu i szacowania przekrojowego w procesie przewidywania zagrożenia chemicznego stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K_BChII_W08) modeli komercyjnych dostępnych na rynku do przewidywania zagrożenia chemicznego (K_BChII_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_BChII_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_BChII_U02, K_BChII_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_BChII_K06); rozumienia potrzeby dalszego kształcenia się (K_BChII_K01); wykazywania kreatywności w pracy w grupie (K_BChII_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. 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_BChII_W01 złożone procesy fizykochemiczne oraz potrafi analizować ich przebieg w powiązaniu z innymi dziedzinami nauki

K_BChII_W02 aksjologiczne uwarunkowania dotyczące stosowania nowoczesnych technik i instrumentów pomiarowych oraz narzędzi informatycznych w chemii z uwzględnieniem aspektów ekonomicznych

K_BChII_W04 specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w diagnostyce chemicznej

K_BChII_U06 analizować w krytyczny sposób dane

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);

doświadczalne metodami numerycznymi i statystycznymi wykorzystując techniki i narzędzia informatyczne K_BChII_K08 kształtowania właściwych wzorców postępowania oraz podejmowania wyzwań w sferze zawodowej i publicznej, uwzględniając zasady etyki zawodowej	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 - spełniać musi każdy model wykorzystywany w procesie komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego; 7. wymieni główne wyzwania stojące przed metodami komputerowego przewidywania zagrożenia chemicznego; 8. zna przykłady modeli komercyjnie dostępnych na rynku do przewidywania zagrożenia chemicznego. Umiejętności Po ukończeniu kursu każdy student: 1. potrafi samodzielnie wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie komercyjnie dostępnych na rynku modeli do przewidywania zagrożenia chemicznego; 2. krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów. Kompetencje społeczne (postawy) Po ukończeniu kursu każdy student: 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); 2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się; 3. wykazuje kreatywność w pracy grupie; 4. wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.
Kontakt agnieszka.gajewicz@ug.edu.pl , tel. 58 523 5246	