



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt 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			
Katedra Chemii Teoretycznej			
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. 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 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 35 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2021/2022 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
Wykład z prezentacją multimedialną		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	
		kryteria oceny zgodne z Regulaminem Studiów UG	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Ocena przedstawionej przez studenta prezentacji o wybranej metodzie chemii obliczeniowej wykraczającej poza kanoniczny kurs chemii (K_W01; K_W05) a jednocześnie odnoszącej 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	
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.	
Wykaz literatury	
D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, 1997 L. Piel, Idee chemii kwantowej, PWN, 2018 A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001 C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Wiley, 2004	
Kierunkowe efekty kształcenia	Wiedza
	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.
	Umiejętności
K_W01: operuje wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych; K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności; K_W11: wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie; K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	Kompetencje społeczne (postawy)
	Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na superkomputerach w centrach obliczeniowych.
Kontakt	
cezary.czaplewski@ug.edu.pl	