



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie w Chemii, PG_00036532						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2021 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnokademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnokademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Nieorganicznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr inż. Andrzej Okuniewski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr inż. Andrzej Okuniewski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	15
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach		Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	15	5.0		30.0		50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z modelowaniem w chemii ze szczególnym uwzględnieniem metod chemii obliczeniowej (modelowanie i grafika molekularna), badań i baz danych strukturalnych (zarówno dla związków małowymiarowych, jak i dla złożonych układów biologicznych).						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu	
	[K6_U08] potrafi zaprojektować i przeprowadzić eksperyment niezbędny do potwierdzenia danej hipotezy oraz widzi szerszy, często pozatechniczny, kontekst analizowanych zjawisk		umie dobrać metodę obliczeniową oraz wybrane jej parametry stosownie do postawionego problemu modelowego celem uzyskania wiarygodnych wyników w możliwie krótkim czasie			[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji	
	[K6_W05] zna i rozumie procesy chemiczne i algorytmy rozwiązań modeli matematycznych niezbędnych do projektowania procesów technologicznych, współzależności struktury chemicznej współcześnie stosowanych materiałów i ich właściwości, umożliwiającą dobór materiałów w technologiach zrównoważonego rozwoju, materiało- i energooszczędnych		rozumie zasadę działania metod modelowania molekularnego (od prostych metod wykorzystujących pola siłowe po złożone metody ab-initio i półempiryczne); ma wiedzę w zakresie modelowania nanomateriałów i układów biologicznych			[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej	
	[K6_K07] ma świadomość swej roli społecznej jako absolwenta uczelni technicznej, zwłaszcza w zakresie przekazywania społeczeństwu informacji i opinii dotyczących zagrożeń i możliwości, jakie stwarzają nauki chemiczne; podejmuje działania, by takie informacje przekazać w sposób zrozumiały		ma świadomość szybkiego rozwoju technik modelowania molekularnego; potrafi w przystępny sposób wyjaśnić, czym jest modelowanie molekularne			[SK2] Ocena postępów pracy	

Treści przedmiotu	Historia chemii strukturalnej. Badania strukturalne. Strukturalne bazy danych. Popularne formaty plików chemicznych. Podstawy modelowania molekularnego. Pola siłowe. Mechanika molekularna. Dynamika molekularna. Symulacje Monte Carlo. Analiza konformacyjna. Symulacje układów biologicznych. Oprogramowanie i sprzęt do modelowania. Grafika molekularna.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student musi mieć opanowane następujące przedmioty na poziomie studiów pierwszego stopnia: matematyka, fizyka, chemia ogólna, chemia teoretyczna.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Kolokwium zaliczeniowe	60.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	A. R. Leach: Molecular Modelling: Principles and Applications. <i>Pearson</i> , 2001.	
	Uzupełniająca lista lektur	L. Piel: Idee chemii kwantowej. <i>Wydawnictwo PWN</i> , Warszawa 2006. P. W. Atkins: Molekularna mechanika kwantowa: wstęp do chemii kwantowej. <i>Wydawnictwo PWN</i> , Warszawa 1974. H. Buchowski: Elementy termodynamiki statystycznej. <i>Wydawnictwa Naukowo-Techniczne</i> , Warszawa 1998.	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	https://chem.pg.edu.pl/kchn/ch-modelowanie-w-chemii		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		