



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wstęp do modelowania układów biologicznych, PG_00049378						
Kierunek studiów	Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2021 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	6	Liczba punktów ECTS			4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej -> Zakład Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Marta Łabuda				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	15.0	15.0	0.0	45
	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	45		4.0		51.0	100
Cel przedmiotu	Zapoznanie studentów z podstawowymi pojęciami i metodami obliczeniowymi niezbędnymi do przeprowadzenia symulacji komputerowych obrazujących właściwości molekuł. Studenci w trakcie kursu zdobędą podstawową wiedzę na temat poszczególnych metod chemii kwantowej i technik obliczeń pozwalających na ich wykorzystanie w praktyce w modelowaniu prostych układów atomowych aż po skomplikowane układy biologiczne.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu	
	[K6_W02] zna i rozumie w zaawansowanym stopniu wybrane prawa i zjawiska fizyczne oraz metody i teorie wyjaśniające złożone zależności między nimi, stanowiące podstawową wiedzę ogólną z dziedziny nauk technicznych, związaną z kierunkiem studiów		Student zna podstawy teoretyczne niezbędne do wykonywania obliczeń w układach atomowych i molekularnych.			[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym	
	[K6_U05] potrafi planować i przeprowadzać eksperymenty związane z kierunkiem studiów, w tym pomiary i symulacje komputerowe oraz interpretować uzyskane wyniki i wyciągać wnioski		Student potrafi wykonać samodzielnie proste obliczenia i symulacje komputerowe przy pomocy danych narzędzi modelowania.			[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji	
	[K6_U07] potrafi wykorzystać metody wspomaganie procesów i funkcji, specyficzne dla kierunków studiów		Student zna podstawowe pojęcia i definicje dotyczących fizyki molekularnej i obliczeń kwantowo-mechanicznych. Student zna i rozróżnia podstawowe metody ab initio chemii kwantowej			[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania	

Treści przedmiotu	Wstęp do modelowania i symulacji komputerowych układów biologicznych. Elektron, atom, cząsteczka. Podstawowe pojęcia i twierdzenia mechaniki kwantowej. Równanie Schrödingera. Ruch jąder i ruch elektronów. Przybliżenie adiabatyczne. Energia wzbudzenia. Krzywe energii potencjalnej. Wprowadzenie do przybliżonych metod obliczeniowych. Metoda pola samouzgodnionego (SCF) i liniowej kombinacji orbitali atomowych (LCAO). Bazy orbitali atomowych. Technika obliczeń. Wybrane metody ab initio. Metoda Hartree-Focka. Metody wielokonfiguracyjne. Metoda oddziaływania konfiguracji(CI). Metoda sprzężonych klastrów. Metoda MP2. Przykłady obliczeń dla prostych molekuł. Pakiety obliczeniowe do badania właściwości molekuł. Charakterystyka. Wady, zalety, ograniczenia. Interpretacja i wizualizacja wyników. Dynamika reakcji chemicznych. Symulacje zderzeń. Modelowanie oddziaływań w prostych reakcjach chemicznych.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawy spektroskopii, technologie informacyjne,		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Laboratoria-raporty	50.0%	60.0%
	Wykład-kolokwium	50.0%	40.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<p>Materiały do przedmiotu w formie skryptu on-line</p> <p>Materiały do przedmiotu opracowane w formie edukacji na odległość w formie slajdów</p> <p>Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005</p> <p>Leach A. „Molecular Modelling: Principles and applications Longman 1996</p> <p>Szabo A., Ostlund N. S. Modern Quantum Chemistry McMillan, New York 1982</p> <p>Schlick T. „Molecular Modeling and Simulation Springer 2002</p> <p>Jensen F. „Introduction to Computational Chemistry, Academic Press 2007</p>	
	Uzupełniająca lista lektur	<p>Manuale użytkownika do pakietów obliczeniowych : www.molpro.net</p> <p>Instrukcje użytkownika interfejsów graficznych : Gabedit, Avogadro, MOLDEN, itp.</p>	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		