



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 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
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_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		
[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			

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 klasterów. 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
	Wykład-kolokwium	50.0%	40.0%
	Laboratoria-raporty	50.0%	60.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Materiały do przedmiotu w formie skryptu on-line Materiały do przedmiotu opracowane w formie edukacji na odległość w formie slajdów Pielka L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005 Leach A. „Molecular Modelling: Principles and applications Longman 1996 Szabo A., Ostlund N. S. Modern Quantum Chemistry McMillan, New York 1982 Schlick T. „Molecular Modeling and Simulation Springer 2002 Jensen F. „Introduction to Computational Chemistry, Academic Press 2007	
	Uzupełniająca lista lektur	Manuale użytkownika do pakietów obliczeniowych : www.molpro.net Instrukcje użytkownika interfejsów graficznych : Gabedit, Avogadro, MOLDEN, itp.	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.