

KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: MODELOWANIE MOLEKULARNE W PRAKTYCE		2. punkty ECTS
		4
		3. kod ECTS
		S/N2CHEMII-O-MODmol-II
4. Kierunek studiów: CHEMIA	5. Ścieżka kształcenia: -	
6. Semestr studiów: II	7. Stopień: studia II stopnia	
8. Forma studiów: studia stacjonarne/niestacjonarne	9. Język wykładowy: polski	
10. Status modułu: obowiązkowy	11. Sposób zaliczenia: egzamin	
12. Grupa: moduł obligatoryjny z zakresu kształcenia podstawowego		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
wykład	wykład z prezentacją multimedialną/ wykład konwersatoryjny	zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych
ćwiczenia audytoryjne	ćwiczenia audytoryjne: analiza przypadków/ dyskusja/ praca w grupach/ metoda projektów	zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych
ćwiczenia komputerowe	ćwiczenia komputerowe: rozwiązywanie zadań z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania [HyperChem, ChemSketch]	zajęcia prowadzone w salach komputerowych
16. Cele i zadania modułu: 1. Nabycie przez studentów wiedzy i umiejętności zastosowania w praktyce zaawansowanych metod modelowania molekularnego w rozwiązywaniu problemów charakterystycznych dla obszaru studiowanego kierunku.		
17. Wymagania formalne: 1. Obecność na zajęciach organizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych i ćwiczeń komputerowych.		
18. Wymagania wstępne: 1. Elementarna wiedza z zakresu modelowania molekularnego zdobyta w czasie studiów I stopnia.		
19. Treści programowe:		
lp.	W - wykład / K - konwersatorium:	
W1	Wprowadzenie do modułu: definicja modelowania molekularnego. Znaczenie modelowania molekularnego we współczesnej chemii.	
W2	Metody fizyczne poznania budowy i dynamiki biomolekuł.	
W3	Mechanika klasyczna w modelowaniu. Pojęcie klasycznej powierzchni energii potencjalnej.	
W4	Mechanika molekularna. Pola siłowe. Minima lokalne oraz globalne.	
W5	Metody modelowania molekularnego: metody ab initio, metody półempiryczne, metody wykorzystujące funkcjonały gęstości. Metody dynamiki molekularnej.	
W6	Metody optymalizacji geometrii cząsteczek.	
lp.	C - ćwiczenia:	
C1	Projektowanie i badanie struktur molekularnych.	
C2	Projektowanie cząsteczek o pożądanych właściwościach chemicznych.	

C3	Przykłady użycia metod modelowania molekularnego w rozumieniu oraz przewidywaniu zjawisk fizyko-chemicznych.
C4-C5	Prezentacje projektów własnych studentów – <i>Przykłady praktycznego zastosowania modelowania molekularnego we współczesnej nauce.</i>
lp.	L – ćwiczenia komputerowe:
L1	Praktyczne zastosowanie zaawansowanych metodologii modelowania molekularnego w rozwiązywaniu problemów charakterystycznych dla chemii organicznej z wykorzystaniem pakietów obliczeniowych/ programów graficznych – studium przypadku.
L2	Praktyczne zastosowanie zaawansowanych metodologii modelowania molekularnego w rozwiązywaniu problemów charakterystycznych dla chemii nieorganicznej z wykorzystaniem pakietów obliczeniowych/ programów graficznych – studium przypadku.
L3	Praktyczne zastosowanie zaawansowanych metodologii modelowania molekularnego w rozwiązywaniu problemów charakterystycznych dla chemii fizycznej z wykorzystaniem pakietów obliczeniowych/ programów graficznych – studium przypadku.
L4	Analiza widmowa molekuł za pomocą programów do modelowania molekularnego.
20. Zakładane efekty uczenia się:	
Wiedza: <i>zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>	
Nr efektu	Efekt uczenia się - WIEDZA
	Student, który zaliczył moduł:
01	zna i charakteryzuje metody, techniki i narzędzia wykorzystywane do rozwiązywania złożonych problemów charakterystycznych dla obszaru studiowanego kierunku.
02	posiada pogłębioną wiedzę w zakresie zastosowań w praktyce metod modelowania molekularnego.
Umiejętności: <i>zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>	
Nr efektu	Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI
	Student, który zaliczył moduł:
03	posiada rozszerzone umiejętności w zakresie zastosowania w praktyce metod modelowania molekularnego.
04	potrafi przygotować, przedstawić i przedyskutować wyniki prowadzonych obliczeń w postaci raportu lub prezentacji.
05	potrafi korzystać z publikacji naukowych i baz danych w celu pozyskania niezbędnych informacji do przygotowania danych do obliczeń.
Kompetencje społeczne: <i>zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania</i>	
Nr efektu	Efekt uczenia się - KOMPETENCJE
	Student, który zaliczył moduł:
06	potrafi samodzielnie określić priorytety służące realizacji zadania zdefiniowanego przez siebie lub innych.
07	jest gotów do systematycznego aktualizowania swojej wiedzy z obszaru modelowania molekularnego oraz dostrzegania możliwości jej praktycznego zastosowania.
20a. Odniesienie modułowych efektów uczenia się do kierunkowych efektów uczenia się:	
Nr efektu modułowego	Symbol EKK
01	KK2P_W03
02	KK2P_W02
03	KK2P_U07
04	KK2P_U12
05	KK2P_U14
06	KK2P_K07
07	KK2P_K02
21. Sposoby oceny:	
F – formująca: F2-prezentacja F6-ocena bieżąca (za wykonanie ćwiczeń)	P – podsumowująca: P2-egzamin pisemny P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru
22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:	

Nr efektu	Treści programowe	Sposób oceny
01	W1-W6, C1-C5, L1-L4	F2, F6, P2, P3
02	W1-W6, C1-C5, L1-L4	F2, F6, P2, P3
03	L1-L4	F2, F6, P2, P3
04	L1-L4	F2, F6, P2, P3
05	L1-L4	F2, F6, P2, P3
06	W1-W6, C1-C5, L1-L4	F2, F6, P2, P3
07	W1-W6, C1-C5, L1-L4	F2, F6, P2, P3

23. Warunek zaliczenia modułu:
Ocena z zaliczenia stanowi średnią ocen zdobytych w czasie semestru, w tym za wykonane ćwiczenia w czasie ćwiczeń komputerowych oraz przygotowanie i wygłoszenie prezentacji nt. *Przykłady praktycznego zastosowania modelowania molekularnego we współczesnej nauce*.
Obowiązująca skala ocen z egzaminu to:

<i>Dostateczny</i>	<i>Dostateczny plus</i>	<i>Dobry</i>	<i>Dobry plus</i>	<i>Bardzo dobry</i>
50-59%	60-69%	70-79%	80-89%	90-100%

24. Całkowity nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów uczenia się w godzinach oraz punktach ECTS:

Ogółem stacjonarne	Ogółem niestacjonarne	stacjonarne	niestacjonarne
100 h	100 h	4 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego		1,8 ECTS	1,28 ECTS
- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy		2,2 ECTS	2,72 ECTS

25. Wykaz **literatury podstawowej** (wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)

- Sadlej J., Metody obliczeniowe chemii kwantowej, Warszawa 1988.
- Nalewajski R.F., Podstawy i metody chemii kwantowej, Warszawa 2001.
- Doskocz M., Modelowanie molekularne w chemii organicznej. Cz. 1, Przygotowanie obliczeń oraz struktura cząsteczek, Wrocław 2007.
- Piela L., Idee chemii kwantowej, Warszawa 2021.

26. Wykaz **literatury uzupełniającej**:

- Hoover W.G., Computational Statistical Mechanics, 1991.
- Haken H., Wolf H.C., Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej, Warszawa 1998.