



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Modelowanie molekularne		13.6.0001	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Zakład Modelowania Molekularnego			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		7 Przedmiot w wymiarze 30h wykładu i 60h ćwiczeń w laboratorium komputerowym + praca własna	
Wykład, Ćw. laboratoryjne			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Wykład: 30 godz., Ćw. laboratoryjne: 60 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - praca własna - przygotowanie się do zaliczenia - wykład - ćwiczenia laboratoryjne w pracowni komputerowej, praca własna - przygotowanie sprawozdań 		Sposób zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - Zaliczenie na ocenę - Zaliczenie (zał) 	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja - ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru 	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Ćwiczenia laboratoryjne: średnia arytmetyczna ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru za pisemne sprawozdania z wykonanych ćwiczeń laboratoryjnych, głównym kryterium oceny sprawozdań są prawidłowe odpowiedzi na pytania zawarte w instrukcji do ćwiczeń. Wykład: przygotowanie i przedstawienie prezentacji o wybranych i uzgodnionym z prowadzącym lub wskazanym przez prowadzącego metodach modelowania molekularnego	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			

zakładany efekt kształcenia	Wykonanie pracy zaliczeniowej	Przygotowanie prezentacji	mtd. dydakt 3	mtd. dydakt 4	mtd. dydakt 5	mtd. dydakt 6	mtd. dydakt 7	mtd. dydakt 8
Wiedza								
K_W01	+	+						
K_W02	+	+						
K_W03	+	+						
K_W04	+	+						
K_W07	+	+						
K_W08	+	+						
Umiejętności								
K_U01	+							
K_U09	+							

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

podstawy informatyki, struktury danych i bazy danych, usługi sieciowe, algorytmika, biofizyka

B. Wymagania wstępne

znajomość systemu Unix w zakresie podstawowym, znajomość podstaw termodynamiki, interpretacji molekularnej procesów chemicznych i właściwości fizykochemicznych

Cele kształcenia

Posługiwanie się narzędziami modelowania molekularnego; określanie i przekształcanie geometrii cząsteczek; wykorzystanie podstawowych metod kwantowochemicznych i/lub empirycznych pól siłowych do opisu właściwości, struktury i reaktywności układów chemicznych; wykorzystanie symulacji do badania termodynamiki i kinetyki zbiorów cząsteczek.

Treści programowe

Wprowadzenie do metod obliczeniowych stosowanych do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym. Współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezyjskie. Metody minimalizacji lokalnej, badanie hiperpowierzchni energii potencjalnej. Zastosowania chemii kwantowej do optymalizacji geometrii, określenia właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek. Podstawy metod półempirycznych. Podstawy empirycznych pól siłowych i ich zastosowanie w analizie konformacyjnej. Podstawy metod symulacji komputerowych: Monte Carlo i dynamika molekularna. Zastosowanie symulacji i termodynamiki statystycznej do określenia entropii i energii termicznej zbiorów cząsteczek. Wyznaczanie efektów solwatacyjnych i zmian energii swobodnej na prostych przykładach.

Wykaz literatury

Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, Heermann Dieter W., WNT 1997
Idee chemii kwantowej, Lucjan Piel, PWN 2005
Molecular Modelling: Principles and Applications, Andrew Leach, Prentice Hall 2001

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W01 ma ogólną wiedzę w zakresie matematyki, biologii, chemii i fizyki pozwalającą na rozumienie podstawowych procesów biologicznych
K_W02 ma wiedzę z zakresu matematyki, biologii, chemii i fizyki w zakresie niezbędnym do opisu, interpretacji i modelowania podstawowych zjawisk i procesów biologicznych
K_W03 ma uporządkowaną, podbudowaną teoretycznie wiedzę ogólną w zakresie programowania, algorytmów i złożoności, języków i paradygmatów programowania, baz danych, inżynierii oprogramowania
K_W04 zna podstawowe konstrukcje programistyczne oraz pojęcia składni i semantyki języków programowania; zna podstawowe metody projektowania, analizowania i programowania algorytmów; zna podstawowe struktury danych i wykonywane na nich operacje
K_W07 zna podstawy analizy numerycznej, zna na

Wiedza

Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego oraz podstawowe bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach ab initio. Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych. Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w metodach chemii kwantowej oraz empiryczne pola siłowe. Rozróżnia metody ab initio i metody półempiryczne oraz orbitale naturalne i zlokalizowane. Definiuje błąd superpozycji bazy.

Umiejętności

Student klasyfikuje metody modelowania molekularnego służące do określenia struktury, charakterystyk spektralnych, właściwości związków chemicznych w różnych stanach skupienia i wybiera odpowiednią metodę chemii obliczeniowej do wspomoczenia pracy eksperymentalnej. Prowadzi obliczenia i symulacje komputerowe w wybranych programach chemii obliczeniowej, analizuje wyniki symulacji komputerowych, porównuje wyniki obliczeń z wartościami eksperymentalnymi.

Kompetencje społeczne (postawy)

poziomie podstawowym co najmniej jeden pakiet do obliczeń symbolicznych, zna podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do prezentacji wyników i analizy danych

K_W08 ma wiedzę zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w naukach ścisłych i przyrodniczych

K_U01 potrafi zastosować wiedzę matematyczną i informatyczną do formułowania, analizowania i rozwiązywania prostych zadań związanych z bioinformatyką

K_U09 stosuje wybrane techniki i narzędzia badawcze z dziedzin nauk przyrodniczych i ścisłych

Kontakt

czarek@chem.univ.gda.pl