



**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Modelowanie molekularne		13.6.0073	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Teoretycznej			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>pierwszego stopnia</b>
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	<b>forma</b>	stacjonarne
		<b>moduł</b>	Podstawowa
		<b>specjalnościowy</b>	Podstawowa
		<b>specjalizacja</b>	Podstawowa
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		5 Przedmiot w wymiarze 15h wykładu i 45h ćwiczeń w laboratorium komputerowym + praca własna	
Wykład, Ćw. laboratoryjne			
<b>Sposób realizacji zajęć</b>			
zajęcia w sali dydaktycznej			
<b>Liczba godzin</b>			
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 45 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2021/2022 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>- praca własna - przygotowanie się do zaliczenia</li> <li>- ćwiczenia laboratoryjne w pracowni komputerowej,</li> <li>praca własna - przygotowanie sprawozdań</li> </ul>		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Zaliczenie na ocenę</li> <li>- Zaliczenie (zał)</li> </ul>	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>- wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja</li> <li>- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru</li> </ul>	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		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	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			

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_U08	+							

**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 kartezjańskie. Metody minimalizacji lokalnej, badanie hiperpowierzchni energii potencjalnej. Zastosowania chemii kwantowej do optymalizacji geometrii, określania 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

**Kierunkowe efekty kształcenia**

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 poziomie podstawowym co najmniej jeden pakiet do

**Wiedza**

Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego oraz podstawowe bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach ab initio. (K\_W01, K\_W02, K\_W08)  
Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych.(K\_W08)  
Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w metodach chemii kwantowej oraz empiryczne pola siłowe. (K\_W03, K\_W07, K\_W08)  
Rozróżnia metody ab initio i metody półempiryczne oraz orbitale naturalne i zlokalizowane. (K\_W08)

**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.(K\_U01)  
Prowadzi obliczenia i symulacje komputerowe w wybranych programach chemii obliczeniowej, analizuje wyniki symulacji komputerowych, porównuje wyniki obliczeń z wartościami eksperymentalnymi. (K\_U08)

<p>obliczeń symbolicznych, zna podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do prezentacji wyników i analizy danych</p> <p>K_W08 ma wiedzę zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w naukach ścisłych i przyrodniczych</p> <p>K_U01 potrafi zastosować wiedzę matematyczną i informatyczną do formułowania, analizowania i rozwiązywania prostych zadań związanych z bioinformatyką</p> <p>K_U08 stosuje wybrane techniki i narzędzia badawcze z dziedzin nauk przyrodniczych i ścisłych</p>	
<b>Kontakt</b>  czarek@chem.univ.gda.pl	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b>