

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Elementy chemii obliczeniowej w praktyce (Ćw. laboratoryjne), PG_00148499						
Kierunek studiów	Bioinformatyka (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej -> Pracownia Chemii Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Iwona Anusiewicz				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	0.0	0.0	30
	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	30		0.0		0.0	30
Cel przedmiotu	Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BIOINL3_W02] Ma wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych	Student definiuje zagadnienia chemiczne możliwe do rozwiązania na drodze teoretycznej, wyjaśnia podejście teoretyczne stosowane do rozwiązania konkretnych problemów chemicznych, opisuje sposób przygotowania danych oraz interpretacji wyników, charakteryzuje metody obliczeniowe stosowane współcześnie do przewidywania struktury i właściwości fizykochemicznych molekuł oraz badania mechanizmów reakcji chemicznych	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[BIOINL3_U02] Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką	Student klasyfikuje dowolny problem chemiczny pod kątem możliwości jego rozwiązania na drodze teoretycznej, ocenia właściwości fizykochemiczne i spektralne molekuł przy użyciu metod obliczeniowych, ocenia mechanizm i przebieg reakcji chemicznej na podstawie wyznaczonych barier aktywacyjnych oraz parametrów charakteryzujących szybkość procesu	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
Treści przedmiotu	przygotowanie danych wejściowych do obliczeń chemicznych oraz liczbowa i graficzna interpretacja wyników, określanie przestrzennej struktury molekuł, uzyskiwanie spektralnych charakterystyk molekuł (symulacja widm IR, NMR, UV), wyznaczanie charakterystyk fizykochemicznych (entalpia, entalpia swobodna, entropia, ciepło właściwe, moment dipolowy i kwadrupolowy, polaryzowalność i hiperpolaryzowalność), modelowanie reakcji chemicznych (badanie mechanizmu, wyznaczanie barier aktywacyjnych, określanie szybkości reakcji).		
Wymagania wstępne i dodatkowe	umiejętność obsługi komputera na poziomie podstawowym.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	sprawozdania z ćwiczeń	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	brak	
	Uzupełniająca lista lektur	Exploring chemistry with electronic structure methods (J.B. Foresman, Æ. Frisch)	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Oblicz wysokość bariery aktywacyjnej reakcji izomeryzacji $\text{CH}_3\text{CN} \rightarrow \text{CH}_3\text{NC}$		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.