


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Elementy chemii obliczeniowej w praktyce		13.3.1149	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
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)			
dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni; dr Sylwia Freza			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Ćw. laboratoryjne			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2022/2023 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
•ćwiczenia laboratoryjne (pracownia komputerowa)		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymanywanych w trakcie trwania semestru	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Ćwiczenia laboratoryjne: <ul style="list-style-type: none"> • Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. • Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego. • Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia. • Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią arytmetyczną ocen otrzymanych ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia 	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			

zakładany efekt kształcenia	konwersatorium	kolokwium	sprawozdanie	egzamin pisemny	egzamin ustny
	Wiedza				
KW_02			x		
	Umiejętności				
KU_02			x		
	Kompetencje				

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

brak

B. Wymagania wstępne

umiejętność obsługi komputera na poziomie podstawowym.

Cele kształcenia

Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych.

Treści programowe

Problematyka ćwiczeń:

- 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).

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć: brak (stosowane są źródła on-line)

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta: brak (stosowane są źródła on-line)

B. Literatura uzupełniająca:

Exploring chemistry with electronic structure methods (J.B. Foresman, Æ. Frisch)

Kierunkowe efekty uczenia się

KW_02: Ma wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych

KU_02: Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką

Wiedza

- 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

Umiejętności

- 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

Kompetencje społeczne (postawy)

- rozumie potrzebę dalszego kształcenia się,
- zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii,
- wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje

Kontakt

iwona.anusiewicz@ug.edu.pl