

Karta przedmiotu

| | | | | | | | |
|--|---|---|-----------------------|------------------------|----------------------------|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu | Computational methods for designing advanced materials (Ćw. audytoryjne), PG_00117803 | | | | | | |
| Kierunek studiów | Chemia (O) | | | | | | |
| Data rozpoczęcia studiów | październik 2024 r. | Rok akademicki realizacji przedmiotu | | | 2025/2026 | | |
| Poziom kształcenia | II stopnia | Grupa zajęć | | | Grupa zajęć fakultatywnych | | |
| Forma studiów | stacjonarne | Sposób realizacji | | | na uczelni | | |
| Rok studiów | 2 | Język wykładowy | | | angielski | | |
| Semestr studiów | 4 | Liczba punktów ECTS | | | 2.0 | | |
| Profil kształcenia | ogólnoakademicki | Forma zaliczenia | | | zaliczenie | | |
| Jednostka prowadząca | Rektor -> Wydział Chemii | | | | | | |
| Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców) | Odpowiedzialny za przedmiot | | dr Alicja Mikołajczyk | | | | |
| | Prowadzący zajęcia z przedmiotu | | | | | | |
| Formy zajęć | Forma zajęć | Wykład | Ćwiczenia | Laboratorium | Projekt | Seminarium | RAZEM |
| | Liczba godzin zajęć | 0.0 | 30.0 | 0.0 | 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 | | 5.0 | | 15.0 | 50 |
| Cel przedmiotu | Celem przedmiotu jest nabycie umiejętności projektowania zaawansowanych materiałów z wykorzystaniem metod obliczeniowych. | | | | | | |

| | | | |
|--|--|---|--|
| Efekty uczenia się przedmiotu | Efekt kierunkowy | Efekt z przedmiotu | Sposób weryfikacji i oceny efektu |
| | [CHEMMU2_U06] Prezentuje w sposób przystępny wyniki odkryć naukowych z chemii i dyscyplin pokrewnych. | Umiejętność budowy modelu regresyjnych i klasyfikacyjnych | [SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny |
| | [CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie. | Zrozumienie idei badań chemii komputerowej | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport |
| | [CHEMMU2_K04] Poprawnie identyfikuje i rozstrzyga dylematy związane z wykonywaniem zawodu chemika. | Umiejętność krytycznej oceny wyników eksperymentów i zrozumienia konieczności ich kontroli | [SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny |
| | [CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych. | Prawidłowo przygotowuje dane (w tym modele molekularne i macierz danych) do projektowania zaawansowanych materiałów | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport |
| | [CHEMMU2_U05] Prezentuje wyniki badań w postaci samodzielnie zredagowanej pracy pisemnej, zawierającej opis i uzasadnienie celu pracy, przyjętą metodologię, wyniki oraz ich znaczenie na tle innych podobnych badań. | Samodzielnie prezentuje wyniki pracy w postaci raportu, przygotowanego zgodnie z wytycznymi | [SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny |
| | [CHEMMU2_K07] Potrafi myśleć i działać w sposób przedsiębiorczy. | Wykonuje analizy chemoinformacyjne, które pozwalają obniżyć koszty i czas badań. | [SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny |
| [CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy. | Opracowanie modeli regresyjne i klasyfikacyjne, prawidłowa walidacja modeli i wykorzystanie modeli do przewidywania toksyczności i/lub funkcjonalności projektowanych materiałów wykorzystuje metody obliczeniowe jako narzędzia wspierające projektowanie zaawansowanych materiałów o określonych właściwościach | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport | |
| [CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań. | Zrozumienie potrzeby głębszego uczenia się jako metody wspierającej projektowanie zaawansowanych materiałów | [SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny | |
| Treści przedmiotu | Koncepcja metod obliczeniowych stosowanych do projektowania zaawansowanych materiałów. Przegląd najnowszych postępów w materiałoznawstwie i narzędzi obliczeniowych używanych do projektowania zaawansowanych chemikaliów i materiałów o pożądanym właściwościach i bezpieczeństwie. Wprowadzenie do nanotechnologii. Zastosowanie zaawansowanych materiałów w nanotechnologii, fotokatalizie i nanomedycynie. Strategia projektowania bezpiecznego i zrównoważonego rozwoju (SSbD) do projektowania zaawansowanych materiałów, które prezentują optymalną kombinację określonych cech, funkcjonalności i bezpieczeństwa. Metody stosowane do rozwoju modeli opartych na fizyce i danych wykorzystywane do opisu i przewidywania zależności ilościowej między strukturą, właściwościami i toksycznością zaprojektowanych zaawansowanych materiałów (modelowanie odwrotne, sieci przewidywania struktury i aktywności, SAPNet). | | |
| Wymagania wstępne i dodatkowe | Podstawowa wiedza z chemii | | |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się | Sposób oceniania (składowe) | Próg zaliczeniowy | Składowa oceny końcowej |
| | raport | 51.0% | 100.0% |
| Zalecana lista lektur | Podstawowa lista lektur | I. A. Parinov, S.-H. Chang, V. K. Gupta: Advanced Materials. Springer 2017. ISBN: 978-3-319-78918-7 A. Tiwari; N. A. Murugan; R. Ahuja. Advanced Engineering Materials and Modeling. Scrivener Publishing. ISBN-13: 9781119242468 S. Thomas, N. Kalarikkal, A.M. Stephan, B. Raneesh, Advanced Nanomaterials, Synthesis, Properties, and Applications, Academic Press, ISBN 9781774633090 | |
| | Uzupełniająca lista lektur | - | |

| | Adresy eZasobów | Adresy na platformie eNauczanie: |
|---|-----------------|----------------------------------|
| Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania | | |
| Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu | Nie dotyczy | |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.