

Karta przedmiotu

|  |   |   |                        |                       |  |            |       |
|--|---|---|------------------------|-----------------------|--|------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu                   | Introduction to digital chemistry (Wykład), PG_00054862   |   |                        |                       |  |            |       |
| Kierunek studiów                         | Chemia (O)  |   |                        |                       |  |            |       |
| Data rozpoczęcia studiów                 | październik 2024 r.   | Rok akademicki realizacji przedmiotu  |                        |                       | 2024/2025  |            |       |
| Poziom kształcenia                       | II stopnia  | Grupa zajęć   |                        |                       | Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów |            |       |
| Forma studiów                            | stacjonarne   | Sposób realizacji   |                        |                       | na uczelni   |            |       |
| Rok studiów                              | 1   | Język wykładowy   |                        |                       | angielski<br>Angielski                               |            |       |
| Semestr studiów                          | 1   | Liczba punktów ECTS   |                        |                       | 1.0  |            |       |
| Profil kształcenia                       | ogólnoakademicki  | Forma zaliczenia  |                        |                       | zaliczenie   |            |       |
| Jednostka prowadząca                     | Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska  |   |                        |                       |  |            |       |
| Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców) | Odpowiedzialny za przedmiot   | prof. dr hab. Tomasz Puzyn  |                        |                       |  |            |       |
|  | Prowadzący zajęcia z przedmiotu   | prof. dr hab. Tomasz Puzyn<br>dr hab. Rafał Ślusarz<br>dr Lidia Chomicz-Mańka<br>dr Jakub Brzeski |                        |                       |  |            |       |
| Formy zajęć                              | Forma zajęć   | Wykład  | Ćwiczenia              | Laboratorium          | Projekt  | Seminarium | RAZEM |
|  | Liczba godzin zajęć   | 10.0  | 0.0                    | 0.0                   | 0.0  | 0.0        | 10    |
|  | 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  | 10  | 2.0                    | 13.0                  | 25   |            |       |
| Cel przedmiotu                           | <p>Celem przedmiotu jest wprowadzenie studenta w świat chemii cyfrowej:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>ogólne pokazanie głównych metod z podziałem na (i) metody wywodzące się z fizyki (klasycznej i kwantowej) oraz (ii) metody oparte na danych.;</li> <li>pokazanie obszarów zastosowania obydwu grup metod do projektowania nowych związków chemicznych i materiałów.</li> </ul> |   |                        |                       |  |            |       |

|   |   |  |  |
|---|---|--|--|
| Efekty uczenia się przedmiotu   | Efekt kierunkowy  | Efekt z przedmiotu   | Sposób weryfikacji i oceny efektu  |
|   | [CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.  | Student potrafi odnaleźć niezbędne informacje w literaturze specjalistycznej, bazach danych i innych źródłach, a także orientuje się w liście najważniejszych czasopism naukowych.   | [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny   |
|   | [CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.  | Student potrafi dokonać wyboru odpowiednich technik eksperymentalnych i teoretycznych niezbędnych do dokonania opisu i modelowania złożonych procesów chemicznych.   | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny   |
|   | [CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.  | Student jest świadomy zakresu własnej wiedzy i rozumie potrzebę dalszego kształcenia się.  | [SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja   |
|   | [CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy.  | Student stosuje nabytą wiedzę do opisu właściwości związków chemicznych, metod ich syntezy i analizy.  | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny<br>[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja |
|   | [CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.  | Student wykazuje szeroką wiedzę dotyczącą aktualnych kierunków badań w zakresie chemii i najnowszych osiągnięć w tej dziedzinie.   | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny<br>[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja |
|   | [CHEMMU2_U06] Prezentuje w sposób przystępny wyniki odkryć naukowych z chemii i dyscyplin pokrewnych.   | Student potrafi zaprezentować wyniki i osiągnięcia w zakresie chemii i dyscyplin pokrewnych  | [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny   |
|   | [CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.  | Student stosuje zdobytą wiedzę w obszarze chemii i dyscyplinach pokrewnych   | [SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja<br>[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny |
| [CHEMMU2_W09] Klasyfikuje specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w ocenie statystycznej wyników eksperymentu. | Student posiada umiejętność klasyfikacji specjalistycznych narzędzi IT używanych w statystycznym opracowaniu wyników eksperymentalnych  | [SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny   |  |
| Treści przedmiotu   | Przegląd najważniejszych aspektów chemii cyfrowej, z uwzględnieniem dokonanych w ostatnim czasie postępów w obszarach chemii materiałowej, modelowaniu molekularnym, sztucznej inteligencji, uczeniu maszynowym, które są wykorzystywane na uczelniach badawczych i w przemyśle do projektowania i syntezy zaawansowanych materiałów. |  |  |
| Wymagania wstępne i dodatkowe   | Wiedza w zakresie podstaw chemii i fizyki   |  |  |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się   | Sposób oceniania (składowe)   | Próg zaliczeniowy  | Składowa oceny końcowej  |
|   | Egzamin pisemny w formie testu  | 51.0%  | 100.0%   |
| Zalecana lista lektur   | Podstawowa lista lektur   | <p>J. D. Lee Concise inorganic chemistry</p> <p>L. Jones, P. Atkins Chemical principle</p> <p>S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (ed): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009</p> <p>R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005</p> <p>Molecular Modelling: Principles and Applications, Andrew Leach, Prentice Hall 2001</p> <p>Ideas of quantum chemistry, Lucjan Piela, Elsevier 2006</p> |  |

|   |  |   |
|---|--|---|
|   | Uzupełniająca lista lektur   | <p>L. Pauling General chemistry</p> <p>J. Leszczynski, A. Kaczmarek-Kedziera, T. Puzyn, M. G. Papadopoulos, H. Reis, M. Shukla (ed): Handbook of Computational Chemistry (2nd Edition). Springer 2016. Volume 5: Chemoinformatics, Puzyn T (ed.).</p> <p>T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin (ed): Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications. Springer 2010. ISBN: 978-1-4020- 9782-9.</p> <p>K. Roy, S. Kar, R. Narayan Das (ed): A Primer on QSAR/QSPR Modeling - Fundamental Concepts. Springer 2015. ISBN: 978-3-319-17281-1.</p> |
|   | Adresy eZasobów  | Adresy na platformie eNauczanie:  |
| Przykładowe zagadnienia/<br>przykładowe pytania/<br>realizowane zadania | Opisz bieżące trendy w zakresie chemii materiałowej lub uczenia maszynowego. |   |
| Praktyki zawodowe<br>w ramach przedmiotu                                | Nie dotyczy  |   |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.