

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Molecular mechanics & dynamics, coarse-grain modeling (Wykład), PG_00117807						
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				
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS	3.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	egzamin				
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Cezary Czaplewski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. Cezary Czaplewski dr hab. Adam Sieradzan					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	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	40.0	75		
Cel przedmiotu	Praktyczne wprowadzenie do technik i narzędzi chemii obliczeniowej stosowanych w modelowaniu molekularnym. Omówienie zasad doboru metod chemii obliczeniowej w zależności od badanego układu.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania. Uczy się zasad bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy przy użyciu komputerów podłączonych do Internetu. Rozwija odpowiedzialność za konto osobiste na stacji roboczej. Rozwija umiejętność pracy w zespole.	[SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student klasyfikuje metody modelowania molekularnego stosowane do wyznaczania struktury, charakterystyki widmowej, właściwości związków chemicznych w różnych stanach skupienia oraz wybiera odpowiednią metodę chemii obliczeniowej aby wspierać prace eksperymentalne.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student analizuje wyniki obliczeń komputerowych, porównuje wyniki obliczeń z danymi eksperymentalnymi.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student definiuje i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego. Rozróżnia metody chemii kwantowej i metody mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student prowadzi obliczenia i symulacje komputerowe z wykorzystaniem wybranych programów chemii obliczeniowej.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student charakteryzuje przybliżenia stosowane w metodach chemii kwantowej i empirycznych polach siłowych.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport	
Treści przedmiotu	Wizualizacja cząsteczek chemicznych i makrocząsteczek. Mechanika molekularna, określanie struktury i zmian konformacyjnych cząsteczek chemicznych. Empiryczne pola siłowe i ich zastosowanie w analizie konformacyjnej. Wprowadzenie do metod symulacji komputerowych: Monte Carlo i dynamika molekularna (MD). Parametryzacja empirycznych pól sił stosowanych w mechanice molekularnej i dynamice molekularnej. Zastosowanie metod ab initio i metod półempirycznych w parametryzacji empirycznych pól siłowych. Modelowanie makrocząsteczek: DNA, RNA, białek i ich kompleksów. Przewidywanie struktury białek. Dokowanie molekularne. Dokowanie białko-peptyd i białko-białko. Inicjatywy CASP i CAPRI. Modelowanie gruboziarniste makrocząsteczek.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	umiejętność pracy w systemie operacyjnym LINUX, podstawy chemii organicznej		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin testowy	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Lucjan Piela, Idee chemii kwantowej, PWN 2018	
	Uzupełniająca lista lektur	Graham Patrick Chemia medyczna, Wydawnictwo Naukowe PWN 2019	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.