

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Specialization lecture: Molecular descriptors (Wykład), PG_00117809						
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 Grupa zajęć fakultatywnych		
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			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr Alicja Mikołajczyk				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr Alicja Mikołajczyk dr hab. Celina Sikorska				
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	Uczeń zna możliwości i ograniczenia deskryptorów molekularnych stosowanych w chemioinformatyce, rozumie sposoby obliczania najważniejszych deskryptorów molekularnych.						

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.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
	[CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania.	[SU5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Uczeń: zna możliwości i ograniczenia deskryptorów molekularnych stosowanych w chemioinformatyce, rozumie sposoby obliczania najważniejszych deskryptorów molekularnych.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Uczeń: podaje przykłady deskryptorów molekularnych wykorzystywanych w modelowaniu, proponuje (wybiera) odpowiednią grupę(y) deskryptorów molekularnych do wykorzystania w rozwiązaniu problemu.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U01] Planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o pogłębionym stopniu złożoności.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizacji zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	Idea deskryptorów molekularnych. Deskryptory teoretyczne i eksperymentalne. Reprezentacja molekularna. Klasyfikacja deskryptorów molekularnych: deskryptory 1D, 2D, 3D i 4D. Indeksy topologiczne: grafy molekularne, macierze grafo-teoretyczne, indeksy łączności, wielomian charakterystyczny, indeksy spektralne. Deskryptory autokorelacji: deskryptory autokorelacji Moreau-Broto, współczynniki Morana i Geary'ego, transformaty auto-krzyżowej kowariancji, autokorelacja właściwości powierzchni molekularnych, pary atomów, Uogólniony Indeks Topologiczny Estrady. Deskryptory geometryczne: indeksy macierzy geometrycznej, deskryptory WHIM, deskryptory GETAWY, transformaty molekularne.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka (w tym rachunek różniczkowy), chemia kwantowa		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Test wielokrotnego wyboru	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Literatura:  T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin (Eds): Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications, Springer, Dodrecht Heidelberg London New York 2010.  Lektury pozalekcyjne:  Journal of Cheminformatics Journal of Chemical Information and Modeling SAR and QSAR in Environmental Research	
	Uzupełniająca lista lektur	Publikacje naukowe w dziedzinie	

	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Idea deskryptorów molekularnych. Deskryptory teoretyczne i eksperymentalne. Reprezentacja molekularna. Klasyfikacja deskryptorów molekularnych: deskryptory 1D, 2D, 3D i 4D. Indeksy topologiczne: grafy molekularne, macierze grafo-teoretyczne, indeksy łączności, wielomian charakterystyczny, indeksy spektralne. Deskryptory autokorelacji: deskryptory autokorelacji Moreau-Broto, współczynniki Morana i Geary'ego, transformaty auto-krzyżowej kowariancji, autokorelacja właściwości powierzchni molekularnych, pary atomów, Uogólniony Indeks Topologiczny Estrady. Deskryptory geometryczne: indeksy macierzy geometrycznej, deskryptory WHIM, deskryptory GETAWY, transformaty molekularne.	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.