

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład monograficzny - Oprogramowanie w chemii obliczeniowej, PG_00129556						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
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	2	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Cezary Czaplewski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
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	Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu	
	[CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.		Student rozpoznaje i charakteryzuje dostępne oprogramowanie do obliczeń z zakresu chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej.			[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport	
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.		Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na superkomputerach w centrach obliczeniowych.			[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport	
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.		Rozróżnia programy do obliczeń z zakresu chemii kwantowej od programów stosujących metody mechaniki molekularnej.			[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport	
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.		Student rozpoznaje i charakteryzuje dostępne oprogramowanie do obliczeń z zakresu symulacji widm w podczerwieni, świetle widzialnym i ultrafioletowym oraz magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR).			[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport	

Treści przedmiotu	<p>Posługiwanie się językami powłok systemu UNIX. Edytor strumieniowy sed i program awk oraz ich zastosowanie do obróbki wyników otrzymanych z programów obliczeniowych. Uruchamianie zadań w centrach obliczeniowych. Systemy kolejkowania: PBS, LSF i NQS. Oprogramowanie metod ab initio i półempirycznych chemii kwantowej: pakiety GAMESS, GAUSSIAN, MOPAC, MOLPRO, TURBOMOLE. Oprogramowanie mechaniki i dynamiki molekularnej: pakiety AMBER, GROMACS, TINKER, NAMD, ECEPPAK. Przeglądarki i edytory molekularne: Avogadro, Molden, MolMol, RasMol, Pymol, VMD, Chimera, Sirius. Baza CSDS struktur krystalograficznych małych molekuł i baza PDB struktur biomolekuł oraz korzystanie z nich.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Technologia informacyjna, Chemia kwantowa, Chemia teoretyczna</p> <p>Umiejętność pracy w systemie Unix, podstawy chemii kwantowej, posługiwanie się terminologią i nomenklaturą dotyczącą chemii kwantowej, umiejętność opisu geometrii cząsteczek związków chemicznych, podstawy mechaniki statystycznej i mechaniki molekularnej</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	prezentacja	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, 2018	
	Uzupełniająca lista lektur	D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, 1997	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.