

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Introduction to digital chemistry (Wykład), PG_00054862						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	1		Liczba punktów ECTS		1.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> 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						
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	Celem przedmiotu jest wprowadzenie studenta w świat chemii cyfrowej: - ogólne pokazanie głównych metod z podziałem na (i) metody wywodzące się z fizyki (klasycznej i kwantowej) oraz (ii) metody oparte na danych.; - pokazanie obszarów zastosowania obydwu grup metod do projektowania nowych związków chemicznych i materiałów.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[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
	[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/ dyskusja [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[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_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 [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[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 [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[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/ dyskusja
	[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_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
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	J. D. Lee Concise inorganic chemistry L. Jones, P. Atkins Chemical principle S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (ed): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009 R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005 Molecular Modelling: Principles and Applications, Andrew Leach, Prentice Hall 2001 Ideas of quantum chemistry, Lucjan Piela, Elsevier 2006	

	Uzupełniająca lista lektur	L. Pauling General chemistry 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.). 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. K. Roy, S. Kar, R. Narayan Das (ed): A Primer on QSAR/QSPR Modeling - Fundamental Concepts. Springer 2015. ISBN: 978-3-319-17281-1.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Opisz bieżące trendy w zakresie chemii materiałowej lub uczenia maszynowego.	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.