Uniwersytet Gdański

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Elementy chemii obliczeniowej w praktyce (Ćw. laboratoryjne), PG_00193536						
Kierunek studiów	Bioinformatyka (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu	2028/2029			
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie		Grupa zajęć	Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki			
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji	na uczelni			
Rok studiów	3		Język wykładowy	polski			
Semestr studiów	5		Liczba punktów ECTS	3.0			
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia	zaliczenie			
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej -> Pracownia Chemii Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Iwona Anusiewicz, prof. UG				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						

Formy zajęć							
	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	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	0.0	45.0	75

Cel przedmiotu	
	Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych.

Efekty uczenia się przedmiotu

Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
[BIOINL3_U02] Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką	Student klasyfikuje dowolny problem chemiczny pod kątem możliwości jego rozwiązania na drodze teoretycznej, ocenia właściwości fizykochemiczne i spektralne molekuł przy użyciu metod obliczeniowych, ocenia mechanizm i przebieg reakcji chemicznej na podstawie wyznaczonych barier aktywacyjnych oraz parametrów charakteryzujących szybkość procesu	[SU2] prezentacja/projekt/referat/ raport
[BIOINL3_W02] Ma zaawansowaną wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych	Student definiuje zagadnienia chemiczne możliwe do rozwiązania na drodze teoretycznej, wyjaśnia podejście teoretyczne stosowane do rozwiązania konkretnych problemów chemicznych, opisuje sposób przygotowania danych oraz interpretacji wyników, charakteryzuje metody obliczeniowe stosowane współcześnie do przewidywania struktury i właściwości fizykochemicznych molekuł oraz badania mechanizmów reakcji chemicznych	[SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport

Treści przedmiotu

przygotowanie danych wejściowych do obliczeń chemicznych oraz liczbowa i graficzna interpretacja wyników,określanie przestrzennej struktury molekuł, uzyskiwanie spektralnych charakterystyk molekuł (symulacja widm IR, NMR, UV), wyznaczanie charakterystyk fizykochemicznych (entalpia, entalpia swobodna, entropia, ciepło właściwe, moment dipolowy i kwadrupolowy, polaryzowalność i hiperpolaryzowalność),modelowanie reakcji chemicznych (badanie mechanizmu, wyznaczanie barier aktywacyjnych, określanie szybkości reakcji).

Wymagania wstępne i dodatkowe

umiejętność obsługi komputera na poziomie podstawowym.

Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się

Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
sprawozdania z ćwiczeń	51.0%	100.0%

Zalecana lista lektur

Podstawowa lista lektur	brak
Uzupełniająca lista lektur	Exploring chemistry with electronic structure methods (J.B. Foresman, Æ. Frisch)
Adresy eZasobów	

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania

Oblicz wysokość bariery aktywacyjnej reakcji izomeryzacji CH_3CN--> CH_3NC

Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu

Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.