

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Cykl rozpoczęcia	2014/2015 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Chemia kwantowa

Kod modułu: 0305-1BF-13-22

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
1BF_22_1	rozumie cywilizacyjne znaczenie chemii kwantowej i jej zastosowań	KBF_W01	2
1BF_22_2	posiada podstawową wiedzę z zakresu chemii kwantowej	KBF_W04	3
1BF_22_3	zna podstawowe oprogramowanie stosowane w modelowaniu molekularnym	KBF_W08	3
1BF_22_4	potrafi korzystać z wybranych pakietów oprogramowania do analizy struktury molekularnej układów atomów	KBF_U06	3
1BF_22_5	potrafi przygotować opracowanie zawierające opis, analizę i wnioski dotyczące otrzymanych wyników obliczeniowych	KBF_U11	3
1BF_22_6	potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł; potrafi integrować pozyskane informacje i dokonywać ich interpretacji, wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie	KBF_U13	2

3. Opis modułu	
Opis	<p>Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami:</p> <ul style="list-style-type: none"> •Podstawy teoretyczne metod obliczeniowych chemii kwantowej. Metody oparte na przybliżeniu jednoelektronowym: metoda SCF w wariancie ab initio i półempirycznym. Efekty korelacyjne. Metody wychodzące poza przybliżenie jednoelektronowe: metoda perturbacyjna MP2, metoda mieszania konfiguracji i metoda sprzężonych klastrów. •Metody oparte na funkcji gęstości - metoda DFT. Równania Kohna - Shama. Metoda DFT oparta na równaniu zależnym od czasu (TDDFT) – widma elektronowe. Metody półempiryczne AM1 i PM3. •Zastosowanie metody DFT i metod półempirycznych do wyznaczania geometrii równowagowej i optymalnej konformacji cząsteczek o znaczeniu biologicznym. Zastosowanie metod kwantowochemicznych do wyznaczania widm molekularnych cząsteczek: widma elektrono-we, oscylacyjne oraz rezonansu magnetycznego. •Oddziaływanie międzycząsteczkowe, przybliżenie supermolekularne, błędy superpozycji bazy. Kwantowochemiczny opis wiązania wodorowego oraz

	<p>wiązania z przeniesieniem ładunku.</p> <ul style="list-style-type: none"> •Podstawy mechaniki molekularnej. Cząsteczki w temperaturach różnych od zera bezwzględnej. Elementy dynamiki molekularnej, generowanie możliwych konformacji ustalanie sta-bilnej konformacji makrocząsteczek. •Zastosowanie metod mechaniki molekularnej i chemii kwantowej do opisu procesów i własności przydatnych w projektowaniu leków: molekularne potencjały elektrostatyczne, ładunki cząstkowe, orbitale graniczne, dysocjacja wiązań <p>na zajęciach laboratoryjnych student:</p> <ul style="list-style-type: none"> •uczy się korzystania z pakietów obliczeniowych chemii teoretycznej i ich stosowania do rozwiązywania problemów chemicznych •wyznacza właściwości molekularne metodami chemii obliczeniowej •przygotowuje sprawozdania zawierające opis, analizę i wnioski dotyczące otrzymanych wyników <p>w ramach pracy własnej student :</p> <ul style="list-style-type: none"> •w oparciu o notatki z wykładów oraz literaturę uzupełniającą dąży do utrwalenia pozyskanej wiedzy •doskonali umiejętności niezbędne do rozwiązywania zadań i problemów z chemii metodami teoretycznymi •podejmuje próbę rozwiązania zadań i problemów zaproponowanych przez prowadzącego na wykładzie <p>Egzamin obowiązkowy</p>
Wymagania wstępne	<p>zna podstawowe pojęcia i twierdzenia z wybranych działów matematyki wyższej</p> <p>posiada podstawową wiedzę z poszczególnych działów chemii obejmującą: chemię nieorganiczną, organiczną i elementy chemii fizycznej</p>

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu

kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
1BF_22_w_1	kolokwium	dwa kolokwia w ramach zajęć laboratoryjnych; termin kolokwium podany do wiadomości dwa tygodnie wcześniej; zadania podobnego typu do zadań rozwiązywanych na zajęciach laboratoryjnych; skala ocen 2-5	1BF_22_2, 1BF_22_3, 1BF_22_4, 1BF_22_5, 1BF_22_6
1BF_22_w_2	aktywność na zajęciach	laboratorium: monitorowanie poprawności wykonywania pracy z pakietami obliczeniowymi; skala ocen 2-5	1BF_22_3, 1BF_22_4, 1BF_22_5, 1BF_22_6
1BF_22_w_3	sprawozdanie	Opracowanie zawierające opis stosowanych metod obliczeniowych, wyniki i wnioski dotyczące obliczeń teoretycznych przeprowadzonych w ramach zajęć laboratoryjnych; skala ocen 2-5	1BF_22_2, 1BF_22_3, 1BF_22_4, 1BF_22_5, 1BF_22_6
1BF_22_w_4	egzamin pisemny	Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest zaliczenie laboratorium; zakres materiału – wszystkie zagadnienia omawiane na wykładach; skala ocen 2-5	1BF_22_1, 1BF_22_2, 1BF_22_3

5. Rodzaje prowadzonych zajęć

kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
1BF_22_fs_1	wykład	wykład wybranych zagadnień podstawowych z wykorzystaniem pomocy audiowizualnych	30	lektura uzupełniająca , praca z podręcznikiem	40	1BF_22_w_4
1BF_22_fs_2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące naukę korzystania z głównych pakietów chemii obliczeniowej oraz ich użycie do rozwiązywania problemów chemicznych.	30	Zapoznanie się z instrukcją ćwiczeń; praca z podręcznikiem; przygotowanie sprawozdania z zajęć laboratoryjnych	20	1BF_22_w_1, 1BF_22_w_2, 1BF_22_w_3