

1.	Field of study	Biophysics
2.	Academic year of entry	2015/2016 (winter term), 2016/2017 (winter term)
3.	Level of qualifications/degree	first-cycle studies
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Chemia kwantowa

Module code: 0305-1BF-13-22

1. Number of the ECTS credits: 5

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 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. Module description	
Description	<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 wariacie 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 elektronowe, 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 bezwzględnego. 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>
Prerequisites	<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. Assessment of the learning outcomes of the module			
code	type	description	learning outcomes of the module
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. Forms of teaching						
code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
1BF_22_fs_1	lecture	wykład wybranych zagadnień podstawowych z wykorzystaniem pomocy audiowizualnych	30	lektura uzupełniająca , praca z podręcznikiem	40	1BF_22_w_4
1BF_22_fs_2	laboratory classes	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące naukę korzystania z głównych pakietów chemii obliczeniowej oraz ich użycie do	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

	rozwiązania problemów chemicznych.			
--	------------------------------------	--	--	--