

1.	Nazwa kierunku	chemia
2.	Cykl rozpoczęcia	2016/2017 (semestr letni)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Modelowanie molekularne

Kod modułu: 0310-CH-S2-B-MM

1. Liczba punktów ECTS: 2

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
0310-CH-S2-B-MM_1	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_2	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_3	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii	CH_K09 CH_K10	3 3
0310-CH-S2-B-MM_4	Objaśnia powiązania chemoinformatyki z chemią organiczną oraz charakteryzuje metody projektowania związków biologicznie aktywnych z uwzględnieniem dokowania molekularnego.	CH_W08 CH_W09	4 5
0310-CH-S2-B-MM_5	Posługuje się dostępnymi chemoinformatycznymi bazami danych i różnymi systemami kodowania związków chemicznych	CH_U11 CH_U12	4 4
0310-CH-S2-B-MM_6	Analizuje dane zawarte w różnych standardach wymiany molekularnej i generuje deskryptory molekularne i używa ich do modelowania QSAR i QSPR.	CH_U12 CH_U13 CH_U14	4 3 4
0310-CH-S2-B-MM_7	Opracowuje procedurę projektowania nowych leków.	CH_U05 CH_U11 CH_U12 CH_U13	2 4 4 3
0310-CH-S2-B-	Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych	CH_K06	4

MM_8		CH_K08	5
------	--	--------	---

3. Opis modułu

Opis	Moduł modelowanie molekularne ma za zadanie zapoznanie studentów z podstawowymi koncepcjami i pojęciami chemoinformatyki w szczególności problemów reprezentacji obiektów molekularnych in silico, ich kodowania oraz przekształceń. Wprowadza studentów w problemy projektowania związków biologicznie aktywnych.
Wymagania wstępne	Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu

kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
0310-CH-S2-B-MM_w_1	egzamin	Egzamin pisemny lub ustny (do wyboru przez studentów na pierwszym wykładzie) weryfikujący wiedzę w oparciu o treści wykładów i ćwiczeń oraz wskazaną w sylabusie literaturę	0310-CH-S2-B-MM_1, 0310-CH-S2-B-MM_2, 0310-CH-S2-B-MM_3, 0310-CH-S2-B-MM_4
0310-CH-S2-B-MM_w_2	kolokwium pisemne	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8
0310-CH-S2-B-MM_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania projektu obliczeniowego	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8
0310-CH-S2-B-MM_w_4	ocenie ciągle	Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium	0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6, 0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8

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	
0310-CH-S2-B-MM_fs_1	wykład	Wykład omawiający podstawowe zagadnienia projektowania molekularnego	15	Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie	15	0310-CH-S2-B-MM_w_1
0310-CH-S2-B-MM_fs_2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące projekt obliczeniowy z zakresu chemoinformatyki i projektowania molekularnego	20	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie obliczeń	32	0310-CH-S2-B-MM_w_2, 0310-CH-S2-B-MM_w_3, 0310-CH-S2-B-MM_w_4



				kwantowochemicznych .		
--	--	--	--	-----------------------	--	--