

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

Moduł kształcenia: Chemia kwantowa i modelowanie molekularne

Kod modułu: 0310-CH-S2-B-062

1. Liczba punktów ECTS: 7

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
0310-CH-S2-B-062_1	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-062_10	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-062_11	Posługuje się dostępnymi chemoinformatycznymi bazami danych i różnymi systemami kodowania związków chemicznych	CH_U11 CH_U12	4 4
0310-CH-S2-B-062_12	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-062_13	Opracowuje procedurę projektowania nowych leków.	CH_U05 CH_U11 CH_U12 CH_U13	1 4 4 3
0310-CH-S2-B-062_14	Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych	CH_K06 CH_K08	4 5
0310-CH-S2-B-062_2	Zna podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w tym metod funkcji falowej, metody DFT i mechaniki molekularnej	CH_W09	5
0310-CH-S2-	Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek	CH_W04	4

B-062_3			
0310-CH-S2-B-062_4	Zna pojęcie funkcji rozdziału i podstawowe pojęcia termodynamiki	CH_W07	3
0310-CH-S2-B-062_5	Potrafi opisać przebieg reakcji chemicznej na gruncie chemii kwantowej	CH_W07	3
0310-CH-S2-B-062_6	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-062_7	Umie zastosować metody chemii kwantowej, zawarte w dostępnych pakietach obliczeniowych, do badania struktury, reaktywności, oddziaływań międzycząsteczkowych i właściwości spektroskopowych związków chemicznych	CH_U02 CH_U07 CH_U08	3 3 5
0310-CH-S2-B-062_8	Umie wyznaczyć energię, entropię oraz potencjały termodynamiczne na poziomie molekularnym	CH_U02	3
0310-CH-S2-B-062_9	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii	CH_K09 CH_K10	3 3

3. Opis modułu

Opis	Moduł Chemia kwantowa i modelowanie molekularne ma za zadanie zapoznanie studentów z ważniejszymi pojęciami chemii teoretycznej, w szczególności wyrobienie umiejętności posługiwania się metodami chemii kwantowej, termodynamiki statystycznej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej do określania struktury, charakterystyki spektralnej i właściwości związków chemicznych jak również opisu reakcji chemicznych na gruncie chemii teoretycznej. Zapoznaje 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-062_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-062_1, 0310-CH-S2-B-062_10, 0310-CH-S2-B-062_2, 0310-CH-S2-B-062_3, 0310-CH-S2-B-062_4, 0310-CH-S2-B-062_5, 0310-CH-S2-B-062_6
0310-CH-S2-B-062_w_2	kolokwium pisemne	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej	0310-CH-S2-B-062_1, 0310-CH-S2-B-062_12, 0310-CH-S2-B-062_2, 0310-CH-S2-B-062_3, 0310-CH-S2-B-062_4, 0310-CH-S2-B-062_6

0310-CH-S2-B-062_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania projektu obliczeniowego	0310-CH-S2-B-062_11, 0310-CH-S2-B-062_12, 0310-CH-S2-B-062_13, 0310-CH-S2-B-062_14, 0310-CH-S2-B-062_7, 0310-CH-S2-B-062_8, 0310-CH-S2-B-062_9
0310-CH-S2-B-062_w_4	oceniające ciągle	Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium	0310-CH-S2-B-062_11, 0310-CH-S2-B-062_12, 0310-CH-S2-B-062_13

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-062_fs_	wykład	Wykład omawiający zagadnienia chemii teoretycznej z użyciem środków audiowizualnych Wykład omawiający podstawowe zagadnienia projektowania molekularnego	45	Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie	25	0310-CH-S2-B-062_w_1
0310-CH-S2-B-062fs2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące projekt obliczeniowy z zakresu chemoinformatyki i projektowania molekularnego	60	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie obliczeń kwantowochemicznych .	50	0310-CH-S2-B-062_w_2, 0310-CH-S2-B-062_w_3, 0310-CH-S2-B-062_w_4