Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki

Karta przedmiotu

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2016/2017

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Biotechnologia — Profil: Ogólnoakademicki

Forma sudiów: stacjonarne — Kod kierunku: B

Stopień studiów: II

Specjalności: Biotechnologia Przemysłowa i w Ochronie Środowiska

1 Informacje o przedmiocie

Nazwa przedmiotu	SB-2 Modelowanie molekularne
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	Molecular modelling
Kod przedmiotu	WITCh B oIIS C13 16/17
Kategoria przedmiotu	Przedmioty kierunkowe
Liczba punktów ECTS	2.00
Semestry	1

2 Rodzaj zajęć, liczba godzin w planie studiów

Semestr	Wykłady	Ćwiczenia	Laboratorium	Laboratorium komputerowe	Projekt	Seminarium
1	15	0	0	15	0	0

3 Cele przedmiotu

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym

4 Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i innych kompetencji

1 Podstawy chemii

2 Chemia fizyczna

5 Efekty kształcenia

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważnieszych metod chemii teoretycznej stosowanych w zagadnieniach modelowania molekularnego

EK2 Wiedza Znajomość metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek

EK3 Umiejętności Umiejętność przygotowania danych wejściowych i uruchomienia prostych obliczeń w zakresie modelowania molekularnego

EK4 Umiejętności Umiejętność interpretacji wyników obliczeń - prognozowanie struktury i właściwości układów chemicznych

6 Treści programowe

Laboratorium komputerowe		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
K1	Modelowanie molekularne wybranych układów: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja uzyskanych wyników.	15

Wykłady		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	2
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	4
W3	Teoretyczne przewidywanie struktury, właściwości oraz reaktywności substancji	1
W4	Klasterowe oraz periodyczne modele ciał stałych. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu dużych cząsteczek oraz materiałów.	3
W5	Modelowanie molekularne biocząsteczek. Bazy bioinformatyczne. Zastosowanie modelowania molekularnego w projektowaniu związków biologicznie czynnych.	2

Wykłady		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W6	Przykłady zastosowania metod teoretycznych w modelowania materiałów, katalizatorów i biokatalizatorów, badaniu procesów katalitycznych oraz projektowaniu związków biologicznie czynnych.	3

7 Narzędzia dydaktyczne

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

N4 Konsultacje

N5 Ćwiczenia laboratoryjne

8 Obciążenie pracą studenta

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	30
Konsultacje przedmiotowe	1
Egzaminy i zaliczenia w sesji	1
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	12
Opracowanie wyników	6
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
Sumaryczna liczba godzin dla przedmiotu wynikająca z całego nakładu pracy studenta	**60**
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla przedmiotu	2.00

9 Sposoby oceny

Ocena podsumowująca

P1 Zaliczenie pisemne

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

Kryteria oceny

Efekt kształcenia 1	
Na ocenę 2.0	Student nie zna metod chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym
Na ocenę 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy najważnieszych metod chemii teoretycznej
Na ocenę 3.5	Student zna nazwy najważniejszych metod, orientuje się w ich możliwościach zastosowań
Na ocenę 4.0	Student zna nazwy najważniejszych metod, w niewielkim stopniu rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań
Na ocenę 4.5	Student zna nazwy najważniejszych metod, dosyć dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań
Na ocenę 5.0	Student zna nazwy najważniejszych metod, bardzo dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań
Efekt kształcenia 2	
Na ocenę 2.0	Student nie zna metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek
Na ocenę 3.0	Student potrafi tylko wymienić niektóre metody
Na ocenę 3.5	Student potrafi wymienić niektóre metody oraz zna w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy
Na ocenę 4.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
Na ocenę 4.5	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety oraz orientuje się w możliwościach zastosowania
Na ocenę 5.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety, orientuje się w możliwościach zastosowania oraz dobrze rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień
Efekt kształcenia 3	
Na ocenę 2.0	Student nie potrafi w ogóle przygotowywać danych wejściowych i uruchamiać prostych obliczeń w zakresie modelowania molekularnego, nawet z pomocą prowadzącego
Na ocenę 3.0	Student nie potrafi samodzielnie wykonać żadnych czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego

Na ocenę 3.5	Student nie potrafi samodzielnie wykonać większości czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - wymaga pomocy prowadzącego
Na ocenę 4.0	Student wykonuje samodzielnie część czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
Na ocenę 4.5	Student wykonuje samodzielnie większość czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga tylko niewielkiej pomocy prowadzącego
Na ocenę 5.0	Student wykonuje w pełni samodzielnie wszystkie czynności związane z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń
Efekt kształcenia 4	
Na ocenę 2.0	Student nie potrafi w ogóle interpretować wyników obliczeń, nawet z pomocą prowadzącego
Na ocenę 3.0	Student nie potrafi samodzielnie interpretować wyników obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego
Na ocenę 3.5	Student nie potrafi samodzielnie interpretować większości wyników obliczeń - wymaga pomocy prowadzącego
Na ocenę 4.0	Student samodzielnie interpretuje część wyników obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
Na ocenę 4.5	Student samodzielnie interpretuje większość wyników obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga tylko niewielkiej pomocy prowadzącego
Na ocenę 5.0	Student w pełni samodzielnie interpretuje wszystkie wyniki obliczeń

10 Macierz realizacji przedmiotu

Efekt kształcenia	Odniesienie danego efektu do szczegółowych efektów zdefiniowanych dla programu	Cele przedmiotu	Treści programowe	Narzędzia dydaktyczne	Sposoby oceny
EK1	K2_W01	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W6	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K2_W01 K2_W07	Cel 1	K1 W1 W3 W4 W5 W6	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3

Efekt kształcenia	Odniesienie danego efektu do szczegółowych efektów zdefiniowanych dla programu	Cele przedmiotu	Treści programowe	Narzędzia dydaktyczne	Sposoby oceny
EK3	K2_U01 K2_U07 K2_U09	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5 W6	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK4	K2_U01 K2_U07 K2_U09	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5 W6	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3

11 Wykaz literatury

Literatura podstawowa

[1] **F. Jensen** — *Introduction to Computational Chemistry*, , 2007, Wiley

[2] **K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori** — *Computational Chemistry and Molecular Modeling*, , 2008, Springer

[3] **C. J. Cramer** — *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, , 2004, Wiley

[4] **P. Bladon, J. Gorton, R. B. Hammond** — *Molecular Modelling: Computational Chemistry Demystified*, , 2011, Royal Society of Chemistry

[5] **H.-D. Holtje** — *Molecular Modeling: Basic Principles and Applications*, , 2008, Wiley-VCH

[6] **G. Schneider, K.-H. Baringhaus** — *Molecular Design: Concepts and Applications*, , 2008, Wiley-VCH

Literatura uzupełniająca

[1] **L. Piela** — *Idee chemii kwantowej*, Warszawa, 2005, PWN

[2] **W. Kołos, J. Sadlej** — *Atom i cząsteczka*, Warszawa, 1998, WNT

[3] **W. Kołos** — *Chemia kwantowa*, Warszawa, 1986, PWN

Literatura dodatkowa

[1] Artykuły naukowe związane z modelowaniem molekularnym

12 Informacje o nauczycielach akademickich

Osoba odpowiedzialna za kartę

dr hab. inż. prof. PK Jarosław Handzlik (kontakt: `jhandz@pk.edu.pl`)

Osoby prowadzące przedmiot

1 dr hab. inż. prof. PK Jarosław Handzlik (kontakt:)

2 dr inż. Paweł Śliwa (kontakt:)

13 Zatwierdzenie karty przedmiotu do realizacji

(miejscowość, data) (odpowiedzialny za przedmiot) (dziekan)

Przyjmuję do realizacji (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

. . . . . .

. . . . . .