

**KARTA PRZEDMIOTU**

<b>Kod przedmiotu</b>	<b>0512.6.BIOT1.D.PMM</b>	
<b>Nazwa przedmiotu w języku</b>	polskim	<b>Podstawy modelowania molekularnego</b> <i>Introduction to molecular modelling</i>
	angielskim	

**1. USYTUOWANIE PRZEDMIOTU W SYSTEMIE STUDIÓW**

<b>1.1. Kierunek studiów</b>	biotechnologia
<b>1.2. Forma studiów</b>	stacjonarne
<b>1.3. Poziom studiów</b>	studia pierwszego stopnia licencjackie
<b>1.4. Profil studiów*</b>	ogólnoakademicki
<b>1.5. Osoba przygotowująca kartę przedmiotu</b>	dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK
<b>1.6. Kontakt</b>	pawel.rodziewicz@ujk.edu.pl

**2. OGÓLNA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU**

<b>2.1. Język wykładowy</b>	polski
<b>2.2. Wymagania wstępne*</b>	Umiejętności w zakresie przedmiotów – matematyka oraz fizyka

**3. SZCZEGÓŁOWA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU**

<b>3.1. Forma zajęć</b>	stacjonarne: wykład (15 godzin), laboratorium (15 godzin)	
<b>3.2. Miejsce realizacji zajęć</b>	zajęcia w pomieszczeniu dydaktycznym UJK	
<b>3.3. Forma zaliczenia zajęć</b>	wykład – egzamin, konwersatorium – zaliczenie z oceną	
<b>3.4. Metody dydaktyczne</b>	wykład konwersatoryjny, ćwiczenia przedmiotowe, dyskusja grupowa	
<b>3.5. Wykaz literatury</b>	<b>podstawowa</b>	1. L. Piel "Idee chemii kwantowej", PWN, 2012
	<b>uzupełniająca</b>	1. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera "Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym", Wydawnictwo Naukowe UMK, 2014

**4. CELE, TREŚCI I EFEKTY UCZENIA SIĘ**

<b>4.1. Cele przedmiotu (z uwzględnieniem formy zajęć)</b> <b>Wykład:</b> C1. Poznanie podstaw wiedzy z metod obliczeniowych mechaniki kwantowej oraz mechaniki molekularnej niezbędnych do wykonywania obliczeń statycznych oraz symulacji za pomocą dynamiki molekularnej dla układów składających się z cząsteczek chemicznych C2. Kształtowanie postawy krytycznej wobec pozyskiwanych informacji <b>Laboratorium:</b> C1. Nabywanie umiejętności wykonywania obliczeń statycznych za pomocą metod obliczeniowych mechaniki kwantowej oraz mechaniki molekularnej dla wybranych układów modelowych. C2. Kształtowanie krytycznej oceny elementów prowadzonego rozumowania.		
<b>4.2. Treści programowe (z uwzględnieniem formy zajęć)</b> <b>Wykład:</b> 1. Przedstawienie podstawowych założeń metod obliczeniowych mechaniki kwantowej: metoda Hartree-Fock'a (HF), rachunek zaburzeń Møller-Plesset'a (MP), metoda oddziaływania konfiguracji (CI) oraz sprzężonych klasterów (CC). 2. Teoria funkcjonału gęstości (DFT). 3. Mechanika molekularna (MM) oraz stosowane obecnie pola siłowe (FF). 4. Sposoby przedstawiania struktury cząsteczek chemicznych: współrzędne kartezjańskie oraz wewnętrzne (macierz Z). 5. Metoda dynamiki molekularnej. 6. Modelowanie zjawisk rzadkich z użyciem więzów. <b>Konwersatorium:</b> 1. Przedstawienie cząsteczek chemicznych za pomocą współrzędnych kartezjańskich oraz wewnętrznych (macierz Z). 2. Przeglądanie struktur zdeponowanych w bazie Protein Data Bank oraz omówienie zawartości plików PDB. 3. Wizualizacja cząsteczek chemicznych. 4. Optymalizacja funkcji falowej oraz optymalizacja geometrii dla wybranych układów. 5. Obliczenia energii oddziaływania oraz wiązania. 6. Analiza parametrów strukturalnych badanych układów		

**4.3. Przedmiotowe efekty uczenia się**

<b>Efekt</b>	<b>Student, który zaliczył przedmiot</b>	<b>Odniesienie do kierunkowych efektów uczenia się</b>
<b>w zakresie WIEDZY:</b>		
W01	Wymienia metody obliczeniowe mechaniki kwantowej oraz podaje ich założenia	BIOT1A_W05
W02	Podaje założenia mechaniki molekularnej oraz wymienia składniki stosowanych pól siłowych	BIOT1A_W05

w zakresie <b>UMIEJĘTNOŚCI:</b>		
U01	Buduje macierz Z na podstawie zadanych współrzędnych kartezjańskich	BIOT1A_U02
U02	Oblicza energie oddziaływania oraz wiązania	BIOT1A_U02
w zakresie <b>KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH:</b>		
K01	Precyzyjnie formułuje pytania służące do pogłębienia zrozumienia danego tematu i krytycznej oceny elementów własnego rozumowania	BIOT1A_K01

#### 4.4. Sposoby weryfikacji osiągnięcia przedmiotowych efektów uczenia się

Efekty przedmiotowe (symbol)	Sposób weryfikacji (+/-)																				
	Egzamin ustny/pisemny*			Kolokwium*			Projekt*			Aktywność na zajęciach*			Praca własna*			Praca w grupie*			Inne: <i>sprawozdanie</i>		
	Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć		
	W	C	...	W	C	L	W	C	...	W	C	L	W	L	...	W	L	...	W	L	...
W01				+																	
W02				+																	
U01				+		+															
U02				+		+															
K01												+									

\*niepotrzebne usunąć

#### 4.5. Kryteria oceny stopnia osiągnięcia efektów uczenia się

Forma zajęć	Ocena	Kryterium oceny
wykład (W) (w tym e-learning)	3	Student z pisemnego kolokwium zaliczeniowego zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów
	3,5	Student z pisemnego kolokwium zaliczeniowego zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z pisemnego kolokwium zaliczeniowego zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z pisemnego kolokwium zaliczeniowego zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z pisemnego kolokwium zaliczeniowego zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów
Laboratoria (K)* (w tym e-learning)	3	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów. Ocena końcowa jest oceną z przeprowadzonego kolokwium. Stwierdzona przez prowadzącego oraz odnotowana na liście obecności aktywność studenta na minimum 3 zajęciach powoduje podniesienie końcowej oceny o 0.5 stopnia.
	3,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów

### 5. BILANS PUNKTÓW ECTS – NAKŁAD PRACY STUDENTA

Kategoria	Obciążenie studenta	
	Studia stacjonarne	Studia niestacjonarne
LICZBA GODZIN REALIZOWANYCH PRZY BEZPOŚREDNIM UDZIALE NAUCZYCIELA /GODZINY KONTAKTOWE/	45	
Udział w wykładach	15	
Udział w konwersatoriach	28	
Udział w kolokwium zaliczeniowym	2	
SAMODZIELNA PRACA STUDENTA /GODZINY NIEKONTAKTOWE/	30	
Przygotowanie do wykładu	2	
Przygotowanie do ćwiczeń	8	
Przygotowanie do egzaminu/kolokwium	20	
ŁĄCZNA LICZBA GODZIN	75	
PUNKTY ECTS za przedmiot	3	

\*niepotrzebne usunąć

Przyjmuję do realizacji (data i czytelne podpisy osób prowadzących przedmiot w danym roku akademickim)

.....