

Kod przedmiotu						
Liczba przyznanych punktów ECTS	2					
Nazwa przedmiotu (PL)	Metody i techniki modelowania molekularnego					
Nazwa przedmiotu (EN)	Methods And Techniques In Molecular Modeling					
Język prowadzenia zajęć	English					
Poziom przedmiotu (PL)	Studia III stopnia					
Poziom przedmiotu (EN)	3rd level					
Profil studiów (PL)	Chemia					
Profil studiów (EN)	Chemistry					
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny PŁ (W3)					
Kierownik przedmiotu	Prof. dr hab. inż. Piotr Paneth					
Nazwiska pozostałych wykładowców	Dr hab. inż. Agnieszka Dybała-Defratyka Dr inż. Michał Rostkowski					
Formy i metody kształcenia, liczba godzin	Wykład 9	Ćwiczenia ...	Laboratoriu m 6	Projekt ...	Seminariu m ...	Inne ...
Cele przedmiotu (PL)	Zrozumienie opisu metodyki obliczeń komputerowych w publikacjach naukowych oraz krytyczna ocena zastosowania jej do badanego problemu					
Cele przedmiotu (EN)	Understanding the description of methodology of molecular modeling as presented in scientific papers and its critical evaluation					
Efekty kształcenia przedmiotu (PL)	Po zakończeniu kursu student: 1. rozumie opisy metodyki modelowania molekularnego 2. potrafi wskazać odpowiednią technikę obliczeniową do przewidzenia zadanej własności układu 3. rozpoznaje podstawowe poziomy teorii, opisuje ich możliwości i ograniczenia 4. zna podstawy aparatu matematycznego niezbędnego do zrozumienia modelowania molekularnego					
Efekty kształcenia przedmiotu (EN)	After completing the course students: 1. understand methodology of molecular modeling 2. are able to select appropriate computational technique to predict a respective property of a system 3. recognizes fundamental levels of theory and describe their capabilities and limitations 4. know the basics of mathematical algorithms necessary to understand molecular modeling					
Metody i kryteria weryfikacji efektów kształcenia (PL)	Efekty 1, 3-4 test Efekty 1-4 opracowanie projektu					
Metody i kryteria weryfikacji efektów kształcenia (EN)	Effects 1, 3-4 test Effects 1-4 project					
Wymagania wstępne	Kurs chemii kwantowej, podstawy informatyki					

(PL)		
Wymagania wstępne (EN)	Basics of quantum chemistry, basics of computer science	
Treści merytoryczne przedmiotu (PL)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Podstawowe pojęcia i zagadnienia chemii obliczeniowej; modele, obliczenia, wizualizacja 2. Poziomy teorii wykorzystywane w chemicznych obliczeniach teoretycznych 3. Wpływ funkcji baz na wyniki obliczeń, ekstrapolacja do pełnej bazy, BSSE 4. Metody poszukiwania stanów przejściowych 5. Uwzględnianie otoczenia (enzymy, powierzchnie, rozpuszczalniki) w obliczeniach; QM/MM 6. Obliczenia właściwości spektroskopowych 7. Najpopularniejsze oprogramowanie do obliczeń teoretycznych 8. Platformy obliczeniowe, praca na systemach odległych 	
Treści merytoryczne przedmiotu (EN)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Fundamental concepts and aspects of computational chemistry; models, calculations, visualization 2. Levels of theory used in theoretical predictions of properties 3. Effect of basis set on calculations results, complete basis set, BSSE 4. Transition state search 5. Environmental effects in calculations (solutions, enzymes, surfaces) 6. Modeling spectroscopic properties 7. Common computational chemistry software 8. Computational environment, remote calculations 	
Forma zaliczenia (PL)	Test z materiału wykładowego, mini-projekt	
Forma zaliczenia (EN)	Test on the material presented during lectures and report on the mini-project outcome	
Literatura podstawowa (wypełniane w języku prowadzenia zajęć, bez tłumaczenia tytułów publikacji)	<p>Essentials of Computational Chemistry" C.J. Cramer, Wiley, 2nd edition</p> <p>Andrew R. Leach, Molecular Modeling, Prentice Hall, 2001</p>	
Literatura uzupełniająca (wypełniane w języku prowadzenia zajęć, bez tłumaczenia tytułów publikacji)	Most recent publications describing computational methodology, its tools, and results obtained using theoretical approaches	
Przeciętne obciążenie studenta pracą własną – ze zdefiniowaniem form pracy własnej (PL)	Suma wszystkich form zajęć z nauczycielem	15
	<i>Udział w konsultacjach</i>	10
	<i>Udział w pisemnych i/lub praktycznych formach weryfikacji</i>	5
	<i>Opracowanie projektu</i>	15
	<i>Przygotowanie do testu</i>	5
	Suma godzin	50
Przeciętne obciążenie studenta pracą własną – ze zdefiniowaniem form pracy własnej (EN)	Total hours of different forms of classes	15
	<i>Participation in consultation</i>	10
	<i>Participation in written and/or practical forms of assessment</i>	5
	<i>Preparation of the project</i>	15
	<i>Preparation to the written test</i>	5
	Total hours	50

Uwagi (PL)	
Uwagi własne publikowane (PL)	
Uwagi własne publikowane (EN)	
Data aktualizacji	08.01.2015