**Nazwa przedmiotu:**

Metody modelowania molekularnego I

**Koordynator przedmiotu:**

dr inż. Maciej Siekierski

**Status przedmiotu:**

Fakultatywny dowolnego wyboru

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obieralne

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2012/2013

**Liczba punktów ECTS:**

0

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład:  | 0h |
| Ćwiczenia:  | 0h |
| Laboratorium:  | 0h |
| Projekt:  | 0h |
| Lekcje komputerowe:  | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Fizyka, Chemia fizyczna, Matematyka

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

Blok ma na celu zaznajomienie słuchaczy z podstawowymi metodami modelowania molekularnego.

**Treści kształcenia:**

Blok ma na celu zaznajomienie słuchaczy z podstawowymi metodami modelowania molekularnego.
Jako podstawową do prowadzenia zajęć przyjęto półempiryczną metodę kwantową z odwołaniami do metod mechaniki molekularnej. Efektem bloku jest praktyczne opanowanie umiejętności modelowania struktury cząsteczek i krytycznej oceny uzyskanych wyników. Zajęcia będą opierały się na samodzielnej pracy w pracowni komputerowej.

**Metody oceny:**

Prezentacja samodzielnie skonstruowanego modelu.

**Egzamin:**

**Literatura:**

brak

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe