

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Computational methods for designing advanced materials (Ćw. audytoryjne), PG_00117803						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr Alicja Mikołajczyk					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	30.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		15.0	50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest nabycie umiejętności projektowania zaawansowanych materiałów z wykorzystaniem metod obliczeniowych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań.	Zrozumienie potrzeby głębszego uczenia się jako metody wspierającej projektowanie zaawansowanych materiałów	[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy.	Opracowanie modeli regresyjne i klasyfikacyjne, prawidłowa walidacja modeli i wykorzystanie modeli do przewidywania toksyczności i/lub funkcjonalności projektowanych materiałów wykorzystuje metody obliczeniowe jako narzędzia wspierające projektowanie zaawansowanych materiałów o określonych właściwościach	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_K07] Potrafi myśleć i działać w sposób przedsiębiorczy.	Wykonuje analizy chemoinformatyczne, które pozwalają obniżyć koszty i czas badań.	[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U05] Prezentuje wyniki badań w postaci samodzielnie zredagowanej pracy pisemnej, zawierającej opis i uzasadnienie celu pracy, przyjętą metodologię, wyniki oraz ich znaczenie na tle innych podobnych badań.	Samodzielnie prezentuje wyniki pracy w postaci raportu, przygotowanego zgodnie z wytycznymi	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.	Prawidłowo przygotowuje dane (w tym modele molekularne i macierz danych) do projektowania zaawansowanych materiałów	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_K04] Poprawnie identyfikuje i rozstrzyga dylematy związane z wykonywaniem zawodu chemika.	Umiejętność krytycznej oceny wyników eksperymentów i zrozumienia konieczności ich kontroli	[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.	Zrozumienie idei badań chemii komputerowej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U06] Prezentuje w sposób przystępny wyniki odkryć naukowych z chemii i dyscyplin pokrewnych.	Umiejętność budowy modelu regresyjnych i klasyfikacyjnych	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
Treści przedmiotu	Koncepcja metod obliczeniowych stosowanych do projektowania zaawansowanych materiałów. Przegląd najnowszych postępów w materiałoznawstwie i narzędzi obliczeniowych używanych do projektowania zaawansowanych chemikaliów i materiałów o pożądanych właściwościach i bezpieczeństwie. Wprowadzenie do nanotechnologii. Zastosowanie zaawansowanych materiałów w nanotechnologii, fotokatalizie i nanomedycynie. Strategia projektowania bezpiecznego i zrównoważonego rozwoju (SSbD) do projektowania zaawansowanych materiałów, które prezentują optymalną kombinację określonych cech, funkcjonalności i bezpieczeństwa. Metody stosowane do rozwoju modeli opartych na fizyce i danych wykorzystywane do opisu i przewidywania zależności ilościowej między strukturą, właściwościami i toksycznością zaprojektowanych zaawansowanych materiałów (modelowanie odwrotne, sieci przewidywania struktury i aktywności, SAPNet).		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowa wiedza z chemii		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	raport	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	I. A. Parinov, S.-H. Chang, V. K. Gupta: Advanced Materials. Springer 2017. ISBN: 978-3-319-78918-7 A. Tiwari; N. A. Murugan; R. Ahuja. Advanced Engineering Materials and Modeling. Scrivener Publishing. ISBN-13: 9781119242468 S. Thomas, N. Kalarikkal, A.M. Stephan, B. Raneesh, Advanced Nanomaterials, Synthesis, Properties, and Applications, Academic Press, ISBN 9781774633090	
	Uzupełniająca lista lektur	-	

	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.