

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Narzędzia chemii obliczeniowej w analityce kryminalistycznej (Ćw.laboratoryjne), PG_00211811						
Kierunek studiów	Analityka kryminalistyczna						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2028/2029		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Iwona Anusiewicz, prof. UG					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	45.0	0.0	0.0	45
	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	45		5.0		25.0	75
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest nabycie praktycznych umiejętności w zakresie modelowania i analizy właściwości spektroskopowych związków wykorzystywanych lub identyfikowanych w kryminalistyce przy użyciu metod chemii kwantowej oraz pakietu Gaussian. Studenci poznają podstawy przygotowania obliczeń, optymalizacji struktur oraz interpretacji widm IR, Raman, UV-Vis, NMR, ECD/VCD i fluorescencji.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[AKRL3_W08] Absolwent zna i rozumie zastosowanie technologii informacyjnych w analizie danych, interpretacji wyników i raportowaniu badań kryminalistycznych.	Absolwent zna i rozumie zastosowanie technologii informacyjnych w analizie danych obliczeniowych, interpretacji wyników symulacji chemii kwantowej oraz raportowaniu badań spektroskopowych w kontekście kryminalistyki, z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania oraz narzędzi analizy danych.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[AKRL3_W02] Absolwent zna i rozumie w zaawansowanym stopniu metody analityczne stosowane w laboratoriach kryminalistycznych, w szczególności spektroskopowe, chromatograficzne i elektroanalityczne.	Absolwent potrafi wykorzystać metody obliczeniowe chemii kwantowej do analizy i interpretacji danych spektroskopowych stosowanych w kryminalistyce, w tym widm IR, Raman, UV-Vis, NMR, ECD, VCD oraz fluorescencji, wspierając identyfikację substancji chemicznych.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[AKRL3_W03] Absolwent zna i rozumie budowę i właściwości chemiczne związków istotnych w badaniach kryminalistycznych.	Absolwent zna i rozumie budowę oraz właściwości chemiczne związków istotnych w badaniach kryminalistycznych, a także ich wpływ na obserwowane właściwości spektroskopowe w ujęciu obliczeniowej chemii kwantowej.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja
	[AKRL3_K08] Absolwent jest gotów do myślenia i działania w sposób przedsiębiorczy, poszukując innowacyjnych rozwiązań, usprawniając procesy analityczne i inicjując działania sprzyjające modernizacji praktyki kryminalistycznej.	Absolwent jest gotów do podejmowania działań innowacyjnych poprzez zastosowanie metod chemii obliczeniowej w analizie spektroskopowej, usprawnianie interpretacji danych oraz rozwijanie nowoczesnych narzędzi wspierających identyfikację związków chemicznych w kryminalistyce.	[SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
Treści przedmiotu	[AKRL3_U06] Absolwent potrafi wykorzystać oprogramowanie specjalistyczne oraz zaawansowane techniki informacyjno-komunikacyjne do opracowania i wizualizacji danych eksperymentalnych.	Absolwent potrafi wykorzystać oprogramowanie specjalistyczne (np. Gaussian, Molden, Avogadro) oraz narzędzia informatyczne do opracowania, analizy i wizualizacji wyników obliczeń chemii kwantowej, w tym widm spektroskopowych (IR, Raman, UV-Vis, NMR, ECD, VCD).".	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	Treści przedmiotu obejmują wprowadzenie do metod obliczeniowej chemii kwantowej oraz ich zastosowanie w analizie spektroskopowej związków o znaczeniu kryminalistycznym. W ramach zajęć omawiane są podstawy działania pakietów obliczeniowych (Gaussian oraz narzędzi Molden i Avogadro), zasady przygotowania modeli molekularnych oraz interpretacja wyników obliczeń.		
	W części praktycznej studenci wykonują obliczenia i analizują widma spektroskopowe, w tym: IR, Raman, UV-Vis, NMR, elektronowy dichroizm kołowy (ECD), wibracyjny dichroizm kołowy (VCD) oraz fluorescencję stacjonarną.		
	Zajęcia obejmują również zagadnienia związane z optymalizacją geometrii cząsteczek, analizą konformerów, modelowaniem oddziaływań międzycząsteczkowych oraz interpretacją wpływu struktury chemicznej na właściwości spektroskopowe.		
	brak		
Wymagania wstępne i dodatkowe	brak		
Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	projekt	51.0%	100.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Chemia obliczeniowa. J. Harvey, PWN Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Wydawnictwo Naukowe UMK
	Uzupełniająca lista lektur	brak
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	W próbce zabezpieczonej podczas postępowania kryminalistycznego podejrzewa się obecność nieznanego związku organicznego. Korzystając z pakietu Gaussian, wykonaj optymalizację geometrii oraz obliczenia częstości drgań dla zaproponowanych struktur molekularnych na poziomie teorii DFT (np. B3LYP/6-311++G(d,p)). Porównaj obliczone widma IR z widmem eksperymentalnym i zidentyfikuj najbardziej prawdopodobną strukturę nieznanego związku. Omów wpływ grup funkcyjnych oraz budowy molekularnej na obserwowane pasma drgań.	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.