

**Przedmiot: Modelowanie molekularne**  
**Kod przedmiotu: WTiCh/ISt/OSr/C-3c**

- 1. Odpowiedzialny za przedmiot, jego miejsce zatrudnienia i e-mail:** prof. Dr inż. Jerzy Straszko, Instytut Chemii i Podstaw Ochrony Środowiska, e-mail: Jerzy.Straszko@ps.pl
- 2. Język wykładowy:** polski
- 3. Liczba punktów:** 3
- 4. Rodzaj studiów, kierunek, specjalność, kierunek dyplomowania:** studia stacjonarne I stopnia, kierunek Ochrona Środowiska
- 5. Status przedmiotu dla ww. studiów:** obieralny
- 6. Informacje o formach zajęć:**  
- współczynniki pracochłonności (wagi formy zajęć):  $W_w = 1.0$ ,  $W_c = 0.7$

Sem.	Pkt	Wykład		Zajęcia praktyczne							
				Seminarium		Ćw/ćw. komp.		Laboratorium		Projekt	
		G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.
VI	3	15	Z	-	-	15	Z	-	-	-	-

Objaśnienia: Pkt – liczba punktów, G/sem. – liczba godzin w semestrze, F.z. – forma zaliczenia zajęć (E – egzamin, Z – zaliczenie). Ćw. komp – zajęcia w formie ćwiczeń, na stanowiskach komputerowych

**7. Wymagane zaliczenie przedmiotów poprzedzających (lub określenie wymaganej wiedzy):**

**8. Program wykładów**

Mechanika Molekularna. Pola siłowe. Metody modelowania molekularnego: ab initio, empiryczne. Obsługa programu Hyper – Chem.

**9. Program zajęć praktycznych**

Wybór metody ab initio. Orbitale atomów wielofunkcyjnych. Spektrometria UV – VIS. Spektrometria IR. Analiza konformacyjna. Modelowanie związków kompleksowych. Modelowanie komputerowe kryształów. Analiza QSAR.

**10. Literatura**

- J. Straszko, S. Paprota, Chemia Kwantowa, Wydawnictwo Politechniki Szczecińskiej, Szczecin, 1986.
- J. Straszko, S. Paprota, Chemia Kwantowa. Modelowanie molekularne w przykładach, Szczecin, 1999. (maszynopis).