

SYLABUS PRZEDMIOTU

1.	Nazwa przedmiotu w języku polskim oraz angielskim: Eksperymenty numeryczne i AI w zrozumieniu architektury poziomu molekularnego; Numerical experiments and AI in understanding molecular level architecture.
2.	Język wykładowy: język polski lub język angielski w zależności od narodowości i preferencji osób zainteresowanych przedmiotem.
3.	Jednostka prowadząca: przedmiot ogólnouniwersytecki
4.	Kod przedmiotu: zgodny z USOS (nadaje Dział Nauczania)
5.	Rodzaj przedmiotu: przedmiot ponadprogramowy
6.	Kierunek studiów (specjalność): wszystkie kierunki
7.	Poziom studiów: I, II stopień, jednolite studia magisterskie
8.	Semestr: zimowy/letni/przedmiot całoroczny*
9.	Forma zajęć i liczba godzin (w tym liczba godzin zajęć online): zajęcia w trybie stacjonarnym, 27h (9 spotkań, każde 45 minut *3; zajęcia łączące wykład z ćwiczeniem praktycznych umiejętności (warsztat) w sali komputerowej Wydziału Chemii UWr).
10.	Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych dla przedmiotu/modułu (<i>jeśli dotyczy</i>): podstawowa wiedza z matematyki, fizyki i chemii, informatyki (jeśli ten ostatni kurs jest realizowany w ramach programu studiów)
11.	Treści programowe: 1. Wprowadzenie do metod chemii obliczeniowej/komputerowej, czyli co to jest eksperyment numeryczny. Sposoby prezentacji/wizualizacji cząsteczek i makroukładów. 2. Poszukiwanie minimów energetycznych i przewidywanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek w oparciu o wybrane modele statyczne. 3. W jaki sposób znaleźć korelację pomiędzy strukturą a właściwością/aktywnością badanego układu – narzędzia cheminformatyczne i nie tylko (np. AI). 4. Mikroświat widziany oczami mechaniki kwantowej: modelowanie zjawisk tunelowania, powierzchnie energii potencjalnej i swobodnej. 5. Dynamika molekularna – cząsteczki w ruchu: przekazywanie energii, wędrówka po przestrzeni fazowej, dyfuzja, samoorganizacja większych układów. 6. „Ślepy los” w służbie nauki: metody stochastyczne (Monte Carlo), utrzymywanie

	parametrów termodynamicznych (termostat, barostat), poszukiwanie miejsc cząsteczkę leku w receptorze białkowym (dokowanie). Potencjalna rola metod AI w opisie dynamiki układów chemicznych. 7. Podstawy obsługi systemów operacyjnych GNU/Linux; działania na plikach oraz automatyzacja zadań. 8. Elementy programowania w języku Python. Analiza oraz wizualizacja danych w bibliotekach NumPy, Pandas oraz Matplotlib. 9. Proste regresyjne oraz klasyfikacyjne modele uczenia maszynowego. Biblioteka scikit learn.
12.	Literatura obowiązkowa i zalecana (<i>źródła, opracowania, podręczniki, itp.</i>): 1. G. L. Patrick, "An introduction to Medicinal Chemistry", Oxford University Press, 2017. 2. A. Alavi, et al. "Molecular Simulations: Fundamentals and Practice", Wiley-VCH, 2020. 3. J. Harvey, "Chemia obliczeniowa", PWN, 2019. 4. E. Matthews, „Python instrukcje dla programisty. Wydanie III”, Helion, 2019.
13.	Warunki i forma zaliczenia przedmiotu: projekt zaliczeniowy
14.	Łączna liczba godzin: 27h
15.	Liczba punktów ECTS (<i>jeśli dotyczy</i>):

*) wybrać właściwe