

SYLABUS PRZEDMIOTU

1.	Nazwa przedmiotu w języku polskim oraz angielskim: Inżynieria krystaliczna i eksperymenty numeryczne (z zastosowaniem AI) w zrozumieniu architektury poziomu molekularnego; Crystal engineering and numerical experiments (with AI application) in understanding molecular level architecture.
2.	Język wykładowy: język polski.
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*
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 chemii strukturalnej. 2. Wprowadzenie do inżynierii krystalicznej – eksperymentalne metody badawcze. 3. Czy inżynieria krystaliczna jest interdyscyplinarna ? Związek inżynierii krystalicznej z Modelowaniem Molekularnym. 4. Inżynieria krystaliczna a projektowanie nowych związków o określonych właściwościach fizykochemicznych. Czy eksperymenty numeryczne mają

	tutaj zastosowanie ? 5. Wprowadzenie do metod chemii obliczeniowej/komputerowej, czyli co to jest eksperyment numeryczny. Sposoby prezentacji/wizualizacji cząsteczek i makroukładów. 6. Podstawy obsługi systemu operacyjnego GNU/Linux; działania na plikach oraz automatyzacja zadań. Superkomputer – a co to takiego ? 7. Poszukiwanie minimów energetycznych i przewidywanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek w oparciu o wybrane modele statyczne. Próba projektowania nowych cząsteczek/materiałów w oparciu o metody Modelowania Molekularnego. 8. W jaki sposób znaleźć korelację pomiędzy strukturą a właściwością fizykochemiczną badanego układu – narzędzia cheminformatyczne i nie tylko (np. zastosowanie metod AI na przykładzie sieci neuronowych). 9. Mikroświat widziany oczami mechaniki kwantowej: modelowanie zjawisk tunelowania, powierzchnie energii potencjalnej i swobodnej. 10. Dynamika molekularna – cząsteczki w ruchu: przekazywanie energii, wędrówka po przestrzeni fazowej, dyfuzja, samoorganizacja większych układów (zastosowanie metody Cara-Parrinello w modelowaniu kryształów molekularnych). 11. „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.
12.	Literatura obowiązkowa i zalecana (<i>źródła, opracowania, podręczniki, itp.</i>): 1. G. R. Desiraju, "Crystal engineering. The design of organic solids", Elsevier, Amsterdam, 1989 2. G. L. Patrick, "An introduction to Medicinal Chemistry", Oxford University Press, 2017. 3. A. Alavi, et al. "Molecular Simulations: Fundamentals and Practice", Wiley-VCH, 2020. 4. J. Harvey, "Chemia obliczeniowa", PWN, 2019. 5 Wstęp do krystalografii, Jarosław Chojnacki, PWN 2025.
13.	Warunki i forma zaliczenia przedmiotu: projekt zaliczeniowy
14.	Łączna liczba godzin: 27
15.	Liczba punktów ECTS (<i>jeśli dotyczy</i>):

*) wybrać właściwe