

UNIwersytet Jagielloński

Wydział Chemii

Symposium

Technologie Informacyjne dla Chemików

ICTchem 2008

www.chemia.uj.edu.pl/ictchem

19-20.09.2008

PROGRAM SYMPOZJUM

PIĄTEK 19.09.2008

9:30 – 9:45 Otwarcie Sympozjum

9:45 – 10:30 WYKŁAD PLENARNY:
Colin Osborne "Using ICT in Chemistry Teaching" (materiały: str.121)

10:30 – 11:00 WYKŁAD PLENARNY:
Jacek Klinowski „Discovering New Crystal Architectures”

11:00 – 11:20 przerwa

11:20 – 11:40 Barbara Dębska „Wykorzystanie różnych form prezentacji materiałów edukacyjnych w kursach udostępnionych na portalu www.e-chemia.pl” (materiały: str.51)

11:40 – 12:00 Małgorzata Miranowicz „Zdalnie o nauczaniu zdalnym czyli Moodle krok po kroku” (materiały: str.58)

12:00 – 12:20 Agnieszka Jańczyk, Iwona Maciejowska „A new ChemgaPedia unit focused on solid phase chemistry - SOLID project” (materiały: str.62)

12:20 – 12:40 Jan Rajmund Paśko „Czy istnieje potrzeba programów sprawdzających wiedzę?” (materiały: str.65)

12:40 – 13:00 Lucjan Chmielarz, Marcin Molenda, Marek Frankowicz „CHEMEPASS – nowoczesny system egzaminu elektronicznego” (materiały: str.122)

13:00 – 13:20 Agnieszka Węgrzyn, Paweł Kozyra „Zastosowanie narzędzi ICT do ewaluacji i podnoszenia jakości kształcenia” (materiały: str.126)

13:20 – 13:40 Anna Szemberg „E-learning i nowe media w kształceniu - propozycje Wydawnictwa Naukowego PWN”

13:40 – 15:00 obiad

15:00 – 18:00 WARSZTATY: Oprogramowanie do obliczeń kwantowo-mechanicznych – na wybranych przykładach (prowadzenie: FQS Poland, grupa Fujitsu)

PIĄTEK 19.09.2008 (dokończenie)

18:00 – 18:30 sesja plakatowa

około 18:30 Spotkanie na Wydziale Chemii (ogłoszenie wyników konkursu, poczęstunek, dyskusje)

SOBOTA 20.09.2008

9:00 – 9:20 Marek Frankowicz, Janusz Mrozek „Uwagi o e-learningu w Polsce” (materiały: str.117)

9:20 – 9:40 Wacław Makowski „Chemia w Internecie - o wykorzystaniu zasobów Internetu w pracy naukowej chemika” (materiały: str.11)

9:40 – 10:00 Radosław Bomba „Wortal Naukowy „Wiedza i Edukacja” jako przykład wykorzystania Internetu drugiej generacji do celów naukowo edukacyjnych” (materiały: str.57)

10:00 – 10:20 Grzegorz Fic, Grażyna Nowak „Strategie przeszukiwania internetowych baz struktur chemicznych” (materiały: str.15)

10:20 – 10:40 Stefan Witkowski, Agnieszka Węgrzyn „Projekt "Autor" – próba minimalizacji plagiatów wśród studentów” (materiały: str.68)

10:40 – 11:00 przerwa

11:00 – 11:45 WYKŁAD PLENARNY:

A. Prasanna de Silva „2008, A Small Molecule Space Odyssey”

11:45 – 12:05 Maciej Szaleniec „Modelowanie złożoności w chemii metodami statystycznymi z wykorzystaniem pakietu *STATISTICA*” (materiały: str.19)

12:05 – 12:25 Grzegorz Mazur, Marcin Makowski, Mateusz Breła „Cache-Aware Load-Balancing Algorithm for Computational Chemistry Applications” (materiały: str.27)

12:25 – 12:45 Krzysztof Kruczała, Łukasz Łańcucki, Tomasz Spalek, Zbigniew Sojka „Rekonstrukcja profili stężenia z widm 1D EPRI metodą VC-GA: wpływ szumów na poprawność odwzorowania” (materiały: str.32)

12:45 – 13:10 przerwa

13:10 – 13:30 Krzysztof Czarniecki „Praktyczna metoda wykonania klasycznej analizy jakościowej związków nieorganicznych z zastosowaniem cyfrowej wizualizacji wykonywanych eksperymentów” (materiały: str.75)

13:30 – 13:50 Barbara Guzowska-Świder, Michał Urbanek „Lekcja multimedialna wspomagająca nauczanie interpretacji widm w podczerwieni” (materiały: str.80)

13:50 – 14:10 Jan Rajmund Paśko, Danuta Jyż-Kuroś, Aleš Chupáč „Czy nauczycielowi chemii potrzebne są umiejętności programisty?” (materiały: str.72)

14:10 – 14:30 Małgorzata Nodzyńska „Zastosowanie metod statystycznych na zajęciach z dydaktyki chemii” (materiały: str.85)

14:30 Zamknięcie Sympozjum

UWAGA! program może ulec niewielkim zmianom.

SESJA PLAKATOWA

ICT w pracy naukowej:

Ewa Luchter-Wasylewska, Magdalena Górny „Obliczenia komputerowe stałych katalitycznych dla reakcji katalizowanych enzymatycznie: dla studentów i naukowców” (materiały: str.46)

Dariusz Szczepanik, Janusz Mrozek „Communication Theory of Chemical Bond”(materiały: str.42)

Dorota Majda, Filipe A. Almeida Paz, Robert G. Bell, Jacek Klinowski “Discovering new zeolitic frameworks” (materiały: str.44)

Krzysztof Czarniecki „Badanie przemian fazowych z wykorzystaniem cyfrowej rejestracji obrazu mikroskopowego próbki” (materiały: str.37)

Grzegorz Stopa „Komputerowe wspomaganie eksperymentów chemicznych” (materiały: str.47)

Grzegorz Stopa „Substancje chemiczne i BHP” (materiały: str.48)

ICT w nauczaniu chemii:

Paweł Cieśla, Jan Rajmund Paśko „Komunikacja i wymiana informacji pomiędzy studentami a nauczycielami akademickimi” (materiały: str.91)

Jan Rajmund Paśko, Wioleta Kopek „Program wizualizacyjny Macromedia Flash jako element kształcenia przyszłych nauczycieli” (materiały: str.95)

Eliza Rybska, J. Błoszyk, R. Bajaczyk „Zastosowanie technologii informacyjnych w nauczaniu przedmiotu „Biogeografia” na Wydziale Biologii Uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu” (materiały: str.99)

Grzegorz Stopa „Chemia w internecie. Prawda czy czyhające niebezpieczeństwa” (materiały: str.100)

Grzegorz Stopa „Komputer - pomoc czy zagrożenie dla dydaktyki chemii” (materiały: str.101)

Kinga Mlekodaj, Piotr Legutko „Rozwój systemu pomocy w portalu Aria” (materiały: str.102)

Monika Pasionek, Jan Kaczmarczyk, Stefan Witkowski „Bezpieczeństwo w laboratorium – zastosowanie metod blended-learningowych w nauczaniu pierwszej pomocy” (materiały: str.103)

Aleksandra Kalisz, Stefan Witkowski, Anna Migdał-Mikuli „Badanie skuteczności nauczania metodą blended learning na przykładzie kursu podstaw chemii” (materiały: str.104)

Monika Ruszak, Agnieszka Węgrzyn, Stefan Witkowski „Standaryzacja narzędzi e-nauczania” (materiały: str.105)

Postery prosimy udostępnić przez cały dzień w piątek. Materiały i narzędzia do zamocowania posterów (na tablicach wielkości A0) dostępne w recepcji.

tematyka WARSZTATÓW

WARSZTATY:

(prowadzenie: FQS Poland, grupa Fujitsu)

Celem warsztatów jest zapoznanie uczestników z metodyką symulacji dynamiki molekularnej oraz z jej zastosowaniem do rozwiązywania różnego rodzaju problemów badawczych, na przykładzie programu Materials Explorer firmy FUJITSU.

Materials Explorer jest pakietem oprogramowania do dynamiki molekularnej dla stacji roboczych działających pod systemem Windows. Intuicyjny interfejs graficzny ułatwia budowanie układów molekularnych, wykonywanie obliczeń oraz analizę wyników. Materials Explorer może być stosowany do badania układów zawierających metale oraz związki nieorganiczne, jak również cząsteczki organiczne, polimery i biomolekuły. Materials Explorer posiada bardzo rozbudowaną bibliotekę potencjałów oraz parametryzacji dla szerokiego zakresu oddziaływań międzyatomowych.

Praktyczne zastosowanie dynamiki molekularnej do symulacji układów wielofazowych zostanie zaprezentowane na przykładzie absorpcji cząsteczek wody w komórce zeolitu A (Linde Type A). Wykonywane ćwiczenie umożliwi uczestnikom poznanie metodyki przygotowania, wyboru optymalnych parametrów, relaksacji a następnie wykonania symulacji metodą dynamiki molekularnej. Omówione również zostaną specjalistyczne narzędzia, dostępne w programie Materials Explorer, umożliwiające efektywną analizę wyników przeprowadzonych symulacji. Pod koniec ćwiczeń zostanie przeprowadzona również dyskusja poświęcona zagadnieniom przedstawionym przez uczestników oraz zastosowania metod obliczeniowych do rozwiązywania konkretnych problemów.

**KONKURS
NA NAJLEPSZY
POSTER** **Z NAGRODAMI
OD FIRMY**
 **Helion!!!**

Każdy z Uczestników Sympozjum otrzyma 1 znaczek służący do oceniania posterów. Po wybraniu najlepszego postera znaczek należy przykleić na tablicy posterowej w wyznaczonym do tego celu miejscu. Autorzy posterów z największą ilością głosów zostaną nagrodzeni książkami z katalogu Wydawnictwa Helion.