

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputer zamiast próbówki (Wykład), PG_00080799						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski Polski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			1.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Piotr Skurski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	15
	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	15		2.0		8.0	25
Cel przedmiotu	Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BCHINŻ_U09] Wykorzystując nabytą wiedzę, umiejętności oraz różnorodne źródła informacji naukowej samodzielnie przygotowuje prace pisemne oraz wystąpienia ustne.	Student dokonuje samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHINŻ_W03] Opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych.	Student rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[BCHINŻ_K02] Pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i samodzielność w działaniach oraz efektywnie współdziała w zespole, pełniąc w nim różne role.	Student pracuje w zespole; jest koleżeński, szanuje zwierzchnika i kolegów.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[BCHINŻ_W04] Opisuje rolę eksperymentu i symulacji komputerowych w procesie projektowania zagadnień inżynierskich.	Student wskazuje i wybiera właściwe algorytmy i programy umożliwiające wykonanie obliczeń i rozwiązanie problemu.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
[BCHINŻ_U04] W toku realizacji zadań inżynierskich stosuje metody statystyczne, techniki informatyczne oraz wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do opisu procesów chemicznych i danych eksperymentalnych.	Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia stosując metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej	[SU5] realizacja zadania problemowego	
Treści przedmiotu	<p>Podstawowe informacje zakresu zagadnień chemicznych i problemów, które mogą być rozwiązane przy użyciu metod obliczeniowych, rodzaje programów obliczeniowych, schemat postępowania się pakietami obliczeniowymi, umiejętność zdefiniowania problemu do rozwiązania, umiejętność przeprowadzenia odpowiednich obliczeń, umiejętność poprawnej interpretacji uzyskanego wyniku i wyciągnięcia właściwych wniosków.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Umiejętność obsługi komputera na poziomie podstawowym		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	test końcowy	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Molekularna mechanika kwantowa (P. Atkins, R. Friedman)	
	Uzupełniająca lista lektur	Idee chemii kwantowej (L. Piela)	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Z podanej listy wybierz najdokładniejszą metodę obliczeniową::</p> <p>A. Metoda Hartree-Focka</p> <p>B. Metoda Mollera-Plesseta rzędu drugiego</p> <p>C. Metoda DFT z funkcjonałem B3LYP</p> <p>D. Metoda sprzężonych klasterów w wariacie CCSD(T).</p>		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.