

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Quantum chemistry in practice (Wykład), PG_00054865						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			angielski Angielski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
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		prof. dr hab. Piotr Skurski				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	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	30		5.0		40.0	75
Cel przedmiotu	Zaznajomienie studentów z możliwościami zastosowania metod chemii kwantowej i oprogramowania kwantowochemicznego do rozwiązywania problemów chemicznych						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student krytycznie ocenia wyniki obliczeń teoretycznych i interpretuje je w kontekście przewidywanych właściwości molekuł	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student posiada szeroką wiedzę w zakresie narzędzi obliczeniowych oferowanych przez chemię kwantową	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student ma świadomość zakresu własnej wiedzy i rozumie konieczność dalszego kształcenia się	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student wykorzystuje zdobytą wiedzę o strukturze i właściwościach molekuł, wiedzę z chemii ogólnej oraz dyscyplin pokrewnych	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student wykazuje się głęboką wiedzą w zakresie możliwości rozwiązywania zagadnień chemicznych przy pomocy narzędzi obliczeniowych chemii kwantowej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student wybiera odpowiednie narzędzia obliczeniowe konieczne do rozwiązania różnego typu zagadnień chemicznych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	Podstawowa wiedza w zakresie rodzajów zagadnień chemicznych, które mogą być rozwiązywane metodami obliczeniowymi chemii kwantowej, sposób użycia pakietów obliczeniowych do wyznaczania właściwości fizykochemicznych molekuł. Definiowanie problemu, który należy rozwiązać, umiejętność wykonania wymaganych obliczeń, umiejętność poprawnej interpretacji uzyskanych wyników i sformułowania wniosków, umiejętność przygotowania danych wejściowych do obliczeń przy użyciu oprogramowania kwantowochemicznego. Graficzna interpretacja wyników obliczeń, określanie struktur równowagowych molekuł, wyznaczanie symulowanych widm IR, NMR i UV, określanie parametrów fizykochemicznych (energia, entalpia swobodna, entropia, ciepła właściwe, moment dipolowy i kwadrupolowy, polaryzowalność i hiperpolaryzowalność. Wyznaczanie punktów stacjonarnych i badanie powierzchni energii potencjalnej.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Wiedza z zakresu podstaw chemii i fizyki		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Końcowy egzamin pisemny	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	An Introduction to Theoretical Chemistry, Jack Simons, Cambridge University Press, 2003 Molecular Quantum Mechanics, P. W. Atkins, R. S. Friedman, Oxford University Press Inc., New York (2011) Energetic Principles of Chemical Reactions, J. Simons, Jones and Bartlett Publishers, Inc., 1983.	
	Uzupełniająca lista lektur	Quantum Mechanics in Chemistry, J. Simons, J. Nichols, Oxford University Press (1997) Geometrical Derivative of Energy Surfaces and Molecular Properties, P. Jorgensen, J. Simons, D. Reidel Publ. Company, 1985	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Wymienić kroki obliczeniowe, które należy podjąć w celu określenia entalpii swobodnej reakcji syntezy dipeptydu Gly-Ala w temperaturze 298 K, pod ciśnieniem 1 atm, wychodząc z aminokwasów Gly oraz Ala).		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.