

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Quantum chemistry in practice (Ćw. laboratoryjne), PG_00054866						
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			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		prof. dr hab. Iwona Anusiewicz dr Jakub Brzeski				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	45.0	0.0	0.0	45
	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	45		8.0		22.0	75
Cel przedmiotu	Zaznajomienie studentów z praktycznymi realizacjami metod chemii kwantowej i oprogramowania kwantowochemicznego w rozwiązywaniu problemów chemicznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student posiada szeroką wiedzę w zakresie narzędzi obliczeniowych oferowanych przez chemię kwantową	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW3] opracowanie tekstowe/ praca pisemna
	[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 [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych
	[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	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[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	[SW5] realizacja zadania problemowego
	[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	[SU3] opracowanie tekstowe/ praca pisemna [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych
[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	[SW3] opracowanie tekstowe/ praca pisemna [SW5] realizacja zadania problemowego	
Treści przedmiotu	Praktyczna wiedza i umiejętności 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
	Pisemne sprawozdania z wykonanych ćwiczeń	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	Oceń stabilność izomerów dichloroetyleny, wskaż najbardziej stabilny izomer i wyznacz udział (zawartość procentową) najniższej energetycznych izomerów w mieszaninie w temperaturze 298 K i pod ciśnieniem 1 atm.		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.