

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Monographic lecture - Modern quantum chemistry in use (Wykład), PG_00051258						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr Jakub Brzeski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr Jakub Brzeski				
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	Zdobycie wiedzy o możliwości wykorzystania różnych metod teoretycznych do rozwiązywania problemów chemicznych. Nauczanie studentów o obszarach chemii, w których można skorzystać z zastosowania narzędzi chemii obliczeniowej.						

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.	K_U02: Krytycznie ocenia wyniki wykonanych obliczeń teoretycznych i omawia je w kontekście przewidywania właściwości badanych cząsteczek	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	K_U04: wykorzystuje nabytą wiedzę w celu projektowania nowych cząsteczek o pożądanych właściwościach,	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	K_W07: dobiera odpowiednie narzędzia obliczeniowe niezbędne do rozwiązania różnych problemów chemicznych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	K_W05: ma szeroką wiedzę z zakresu chemii obliczeniowej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	K_W08: wykazuje pogłębioną wiedzę z zakresu typów problemy chemicznych, których rozwiązania można wesprzeć metodami chemii obliczeniowej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań.	K_K03: rozumie potrzebę systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długoterminowym i wie, jak je ustawić priorytety realizacji podjętych zadań	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy; rozumie potrzebę dalszego kształcenia	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	Narzędzia matematyczne stosowane w metodach nowoczesnych metodach chemii kwantowej, metody równań ruchu (EOM), zaawansowane metody sprzężonych klastrów (CC), relatywistyczną chemię kwantową, nowatorskie metody DFT, metody SAPT, kwantowe metody Monte Carlo, metody QM/MM, metody projektowania nowych układów o pożądanych właściwościach.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	podstawowa znajomość chemii i fizyki		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Molecular Quantum Mechanics, P. W. Atkins, R. S. Friedman, Oxford University Press Inc., New York (2011)	
	Uzupełniająca lista lektur	Quantum Mechanics in Chemistry, J. Simons, J. Nichols, Oxford University Press (1997)	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	dobór odpowiedniego funkcjonału DFT do badanego problemu, dobór metody sprzężonych klastrów do badanego problemu, projektowanie nanocząstek o pożądanych właściwościach etc.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.