

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład dyplomowy - Rozmowy o strukturze molekuł: od chmur elektronowych do makrocząsteczek biologicznych (Wykład), PG_00081854						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	6	Liczba punktów ECTS			2.0		
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. Iwona Anusiewicz				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
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		15.0	50
Cel przedmiotu	Przedstawienie studentom wybranych metod ab initio i dynamiki molekularnej w badaniu podstawowych problemów chemicznych; Zaznajomienie studentów z współczesnymi zastosowaniami chemii kwantowej.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[CHEML3_W02] Opisuje w zaawansowanym stopniu właściwości pierwiastków i najważniejszych związków chemicznych, wymienia metody ich otrzymywania oraz sposoby analizy.		opisuje podstawowe właściwości fizyczne najważniejszych związków chemicznych; wymienia najważniejsze metody chemii obliczeniowej; wymienia podstawowe bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach chemicznych;		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U08] Przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii.		planuje właściwy dobór metody obliczeniowej w przypadku różnych cząsteczek chemicznych.		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_K01] Identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego.		rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje		[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_W03] Wyjaśnia w zaawansowanym stopniu zależności pomiędzy strukturą materii a jej obserwowanymi właściwościami.		wyjaśnia zależności pomiędzy strukturą geometryczną i elektronową materii a jej obserwowanymi właściwościami.		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		

Treści przedmiotu	Wybrane metody oparte o funkcjonalną gęstość elektronową i metody ab initio w badaniu podstawowych problemów chemicznych. Praktyczne wprowadzenie do stosowania metod obliczeniowych chemii kwantowej i badań struktury elektronowej molekuł. Korelacja elektronowa. Badanie mechanizmów reakcji. Przykłady współczesnych zastosowań chemii kwantowej. Struktury peptydów i białek. Wstęp do modelowania molekularnego - od eksperymentu do struktury przestrzennej białek.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	kolokwium	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur		Lucjan Pielak Idee chemii kwantowej
	Uzupełniająca lista lektur		P.W. Atkins Molekularna mechanika kwantowa
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Podaj sposób określenia struktur geometrycznych izomerów dichloroetylenu i wyjaśnij kryterium rozpoznania izomeru odpowiadającego minimum globalnemu.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.