

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputer zamiast próbówki (Ćw. laboratoryjne), PG_00080800						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2023 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	3		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	5		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. Piotr Skurski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	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	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_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_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 [SU5] realizacja zadania problemowego
	[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_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.	[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	Przygotowanie danych wejściowych do obliczeń chemicznych oraz liczbową i graficzną interpretację wyników, określanie przestrzennej struktury molekuł, uzyskiwanie spektralnych charakterystyk molekuł (symulacja widm IR, NMR, UV), wyznaczanie charakterystyk fizykochemicznych (entalpia, entalpia swobodna, entropia, ciepło właściwe, moment dipolowy i kwadrupolowy, polaryzowalność i hiperpolaryzowalność), modelowanie reakcji chemicznych (badanie mechanizmu, wyznaczanie barier aktywacyjnych, określanie szybkości reakcji). Umiejętności jakie powinien posiadać Doktorant po wysłuchaniu oferowanego wykładu: Wiedza ogólna zakresu zagadnień chemicznych możliwych do rozwiązania na drodze teoretycznej, wiadomości umożliwiające teoretyczne przewidywanie struktury oraz fizykochemicznych właściwości dowolnych molekuł, umiejętność doboru metody teoretycznej do badania konkretnego zagadnienia chemicznego, wiedza o doborze programu obliczeniowego oraz podstawach obsługi tego typu programów, umiejętność poprawnej interpretacji wyników uzyskiwanych przy użyciu metod obliczeniowych. Umiejętności jakie powinien posiadać Doktorant po wykonaniu oferowanych ćwiczeń: wiedza dotycząca przygotowania danych do pakietów obliczeniowych, umiejętność samodzielnego wykonania obliczeń mających na celu określenie struktury dowolnej molekuły, symulacji widm IR, NMR i UV, wyznaczenie momentu dipolowego i kwadrupolowego, polaryzowalności, hiperpola-ryzowalności, wartości funkcji termodynamicznych, umiejętność samodzielnego modelowania mechanizmu reakcji chemicznej na drodze wyznaczania struktury stanów przejściowych i produktów pośrednich, określania barier kinetycznych i termodynamicznych oraz obliczania stałej szybkości procesu.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Umiejętność obsługi komputera PC na poziomie podstawowym.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Sprawozdania z wykonanych zadań	51.0%	75.0%
	Aktywność podczas zajęć	51.0%	25.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Molekularna mechanika kwantowa (P. Atkins, R. Friedman)	
	Uzupełniająca lista lektur	Idee chemii kwantowej (L. Piela)	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Zaproponować ścieżkę postępowania zmierzającego do wyznaczenia potencjału jonizacji i powinowactwa elektronowego dla danej cząsteczki (przy użyciu dowolnej metody obliczeniowej chemii kwantowej).		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.