

## KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: <b>METODY OBLICZENIOWE W CHEMII</b>		2. punkty ECTS
		<b>5</b>
		3. kod ECTS
		<b>S/N1ChO-F-METOBli-IV</b>
4. Kierunek studiów: <b>Chemia ogólna</b>	5. Ścieżka kształcenia: -	
6. Semestr studiów: <b>IV</b>	7. Stopień: <b>studia I stopnia</b>	
8. Forma studiów: <b>studia stacjonarne/ studia niestacjonarne</b>	9. Język wykładowy: <b>polski</b>	
10. Status modułu: <b>fakultatywny</b>	11. Sposób zaliczenia: <b>zaliczenie</b>	
12. Grupa: <b>moduł fakultatywny do wyboru</b>		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
<b>wykład</b>	<b>wykład z prezentacją multimedialną</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>
<b>ćwiczenia audytoryjne</b>	<b>ćwiczenia audytoryjne: analiza przypadków/ praca w grupach/ dyskusja/ rozwiązywanie zadań</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych/ zajęcia prowadzone w salach informatycznych</b>
16. Cele i zadania modułu: <b>1. Nabycie przez studentów podstaw teoretycznych i praktycznych z zakresu metod obliczeniowych stosowanych do rozwiązywania prostych i złożonych problemów inżynierskich w obszarze studiowanego kierunku studiów.</b>		
17. Wymagania formalne: <b>1. Aktywne uczestnictwo w zajęciach.</b> <b>2. Obecność na zajęciach zorganizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych, możliwość usprawiedliwienia nieobecności na podstawie zwolnienia lekarskiego.</b>		
18. Wymagania wstępne: <b>1. Usystematyzowana wiedza z następujących modułów tj. Matematyka, Podstawy chemii teoretycznej, Technologia informacyjna.</b>		
19. Treści programowe:		
lp.	<b>W - wykład:</b>	
<b>W1</b>	Chemia obliczeniowa – zadania, cele i podział. Możliwości chemii obliczeniowej.	
<b>W2</b>	Podstawowe metody obliczeniowe w chemii. Typy metod obliczeniowych. Modelowanie molekularne.	
<b>W3</b>	Powierzchnie energii potencjalnej (PES).	
<b>W4</b>	Definicja i rodzaje korelacji elektronowej. Metody post-hartreefockowskie.	
<b>W5</b>	Przybliżenia jednoelektronowe.	
<b>W6</b>	Teoria funkcjonału gęstości. Metody DFT. Potencjały wykorzystywane w chemii obliczeniowej.	
<b>W7</b>	Teoria orbitali molekularnych. Podstawy teoretyczne metody obliczania właściwości molekularnych.	
<b>W8</b>	Podstawy teoretyczne metod obliczeniowych uwzględniania wibracji i rotacji molekuł wieloatomowych.	

<b>W9</b>	Podstawy teoretyczne metod obliczeniowych chemii kwantowej, uwzględniające funkcje termodynamiczne układu, stałe równowagi i szybkość reakcji chemicznych.
lp.	<b>C – ćwiczenia:</b>
<b>C1</b>	Podstawy formalizmu matematycznego. Równania Schrödingera [powtórka].
<b>C2</b>	Zastosowanie w praktyce metody Hartree-Focka. Metody przybliżone. Metoda wariacyjna.
<b>C3</b>	Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
<b>C4</b>	Zastosowanie w praktyce metody rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta. Podejście perturbacyjne.
<b>C5</b>	Zastosowanie w praktyce metod wieloreferencyjnych.
<b>C6</b>	Zastosowanie w praktyce elementarnych metod mechaniki molekularnej.
<b>C7</b>	Geometria cząsteczki. Zastosowanie w praktyce metod optymalizacji geometrii.
<b>C8</b>	Dynamika molekularna. Zastosowanie w praktyce metod dynamicznych. Równania ruchu Newtona. Symulacje dynamiki molekularnej.
<b>C9</b>	Zastosowanie w praktyce metod hybrydowych i wielkoskalowych.
<b>C10</b>	Przykłady zastosowania specjalistycznych programów użytkowej w chemii obliczeniowej. Podstawowe funkcje działania pakietu Mathematica lub Gaussian.
<b>20. Zakładane efekty uczenia się:</b>	
<b>Wiedza:</b> zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej	
Nr efektu	<b>Efekt uczenia się - WIEDZA</b>
	Student, który zaliczył moduł:
<b>01</b>	zna i charakteryzuje metody obliczeniowe stosowane do rozwiązywania złożonych problemów w obszarze studiowanego kierunku studiów.
<b>02</b>	ma elementarną wiedzę o specjalistycznych programach komputerowych wspomagających procesy obliczeniowe w chemii.
<b>Umiejętności:</b> zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej	
Nr efektu	<b>Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI</b>
	Student, który zaliczył moduł:
<b>03</b>	potrafi wykorzystać zdobytą wiedzę do rozwiązywania złożonych problemów inżynierskich, jak i prostych obliczeń chemicznych.
<b>04</b>	potrafi korzystać z wybranych programów komputerowych wspomagających procesy obliczeniowe w chemii.
<b>05</b>	korzysta z dostępnej literatury i innych źródeł wiedzy pozwalających na prawidłowe zrozumienie zagadnień z zakresu metod obliczeniowych stosowanych w chemii.
<b>06</b>	ma umiejętność samokształcenia.
<b>Kompetencje społeczne:</b> zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania	
Nr efektu	<b>Efekt uczenia się - KOMPETENCJE</b>
	Student, który zaliczył moduł:
<b>07</b>	prawidłowo ocenia poziom posiadanej przez siebie wiedzy oraz rozumie potrzebę jej ustawicznego rewidowania i pogłębiania.
<b>08</b>	potrafi wykorzystać zdobytą wiedzę do ugruntowania swojej pozycji na rynku pracy.
<b>21. Sposoby oceny:</b>	
<b>F – formująca:</b> <b>F3-sprawdzian</b> <b>F5-odpowiedź ustna</b>	<b>P – podsumowująca:</b> <b>P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru</b> <b>P4-zaliczenie na ocenę</b>
<b>22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:</b>	

Nr efektu	Treści programowe	Sposób oceny
01	W1-W9, C1-C10	F3, F5, P3, P4
02	C10	F5, P3
03	W1-W7, C1-C12	F3, F5, P3, P4
04	C10	F5, P3
05	W1-W9, C1-C10	F3, F5, P3, P4
06	W1-W9, C1-C10	F3, F5, P3, P4
07	W1-W9, C1-C10	F3, F5, P3, P4
08	W1-W9, C1-C10	F3, F5, P3, P4

23. Warunek zaliczenia modułu:  
 Uzyskanie pozytywnej oceny końcowej jest uzależnione od pozytywnych ocen z odpowiedzi ustnych oraz śródsesemestralnych sprawdzianów. Ponadto na ostatnich zajęciach w semestrze studenci przystępują do zaliczenia pisemnego, dla którego obowiązuje następująca skala ocen:

<i>Dostateczny</i>	<i>Dostateczny plus</i>	<i>Dobry</i>	<i>Dobry plus</i>	<i>Bardzo dobry</i>
50-59%	60-69%	70-79%	80-89%	90-100%

Ocenę końcową stanowi średnia ocen zdobytych w czasie semestru.

24. Całkowity nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów uczenia się w godzinach oraz punktach ECTS:

Ogółem stacjonarne	Ogółem niestacjonarne	stacjonarne	niestacjonarne
125 h	125 h	5 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego		2 ECTS	1,44 ECTS
- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy		3 ECTS	3,56 ECTS

25. Wykaz literatury podstawowej (wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)

- Gumiński K/. Elementy chemii teoretycznej, Warszawa 1964.
- Sadlej J., Obliczeniowe metody chemii kwantowej, Warszawa 1988.
- Piela L., Idee chemii kwantowej, Warszawa 2003.
- Kaczmarek-Kędziera A., Ziegler-Borowska M., Kędziera D., Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Toruń 2014.
- Harvey J., Chemia obliczeniowa, Warszawa 2019.

26. Wykaz literatury uzupełniającej:

- Jnsen F., Introduction to Computational Chemistry, Wydanie I, 1999.
- Leitner R., Zarys matematyki wyższej, Warszawa 2017.
- Aktualne wydanie książki Mathematica.