

## KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: <b>PODSTAWY CHEMII TEORETYCZNEJ</b>		2. punkty ECTS
		<b>3</b>
		3. kod ECTS
		<b>S/N1ChO-O-ChemT-III</b>
4. Kierunek studiów: <b>Chemia ogólna</b>	5. Ścieżka kształcenia: -	
6. Semestr studiów: <b>III</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>obowiązkowy</b>	11. Sposób zaliczenia: <b>egzamin</b>	
12. Grupa: <b>moduł obligatoryjny z zakresu kształcenia podstawowego</b>		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
<b>wykład</b>	<b>wykład problemowy/wykład konwersatoryjny/wykład z prezentacją multimedialną</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>
<b>ćwiczenia audytoryjne</b>	<b>ćwiczenia audytoryjne: rozwiązywanie zadań/ praca w grupach/ analiza</b>	<b>zajęcia prowadzone w sala dydaktycznych</b>
16. Cele i zadania modułu: 1. Omówienie podstaw modelowania molekularnego. 2. Zapoznanie studentów z podstawami mechaniki statystycznej. 3. Przygotowanie studentów do zajęć z chemii fizycznej realizowanych w formie ćwiczeń laboratoryjnych.		
17. Wymagania formalne: 1. Aktywne uczestnictwo w zajęciach. 2. Obecność na zajęciach organizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych, możliwość usprawiedliwienia nieobecności na podstawie zwolnienia lekarskiego.		
18. Wymagania wstępne: 1. Elementarna wiedza z zakresu chemii, fizyki i matematyki.		
19. Treści programowe:		
lp.	<b>W - wykład:</b>	
<b>W1</b>	Wprowadzenie do mechaniki kwantowej. Postulaty mechaniki kwantowej.	
<b>W2</b>	Podstawy matematyczne, fizyczne i chemiczne mechaniki kwantowej.	
<b>W3</b>	Proste zastosowania mechaniki kwantowej.	
<b>W4</b>	Układy wielkoelektronowe.	
<b>W5</b>	Oddziaływanie międzycząsteczkowe w chemii kwantowej.	
<b>W6</b>	Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej.	
<b>W7</b>	Podstawy mechaniki i dynamiki molekularnej.	
<b>W8</b>	Podstawy termodynamiki statystycznej. Zastosowanie termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej.	
lp.	<b>C - ćwiczenia</b>	
<b>C1</b>	Zasada nieoznaczoności Heisenberga.	

C2	Ścisłe rozwiązania równania Schrödingera.
C3	Przybliżone metody rozwiązywania równania Schrödingera.
C4	Pakiety obliczeniowe chemii kwantowej.
C5	Metody przybliżone w chemii kwantowej. Metody wariacyjne i metody zaburzeń.
C6	Zastosowanie metod kwantowochemicznych do przewidywania właściwości spektroskopowych molekuł.
C7	Widmo rotacyjne, oscylacyjne. Obliczenia i interpretacja widm.
C8	Zespoły statystyczne. Metoda zespołów statystycznych Gibbsa.

20. Zakładane efekty uczenia się:	
<b>Wiedza:</b> zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej	
<b>Efekt uczenia się - WIEDZA</b>	
Nr efektu	Student, który zaliczył moduł:
01	zna i definiuje elementarne pojęcia właściwe dla chemii kwantowej.
02	zna współczesne metody obliczeniowe mające zastosowanie do rozwiązywania wybranych problemów z obszaru chemii teoretycznej.
<b>Umiejętności:</b> zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej	
<b>Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI</b>	
Nr efektu	Student, który zaliczył moduł:
03	potrafi w praktyce zastosować nabytą wiedzę do rozwiązywania prostych problemów z obszaru chemii teoretycznej.
04	prawidłowo używa symboli i nazewnictwa mających zastosowanie w chemii kwantowej.
<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	
<b>Efekt uczenia się - KOMPETENCJE</b>	
Nr efektu	Student, który zaliczył moduł:
05	krytycznie ocenia poziom swojej wiedzy i kompetencji do rozwiązywania problemów właściwych dla chemii teoretycznej.
06	rozumie potrzebę objaśniania zagadnień chemicznych wybranymi popularno-naukowymi sposobami.

21. Sposoby oceny:	
F – formująca: F3-sprawdzian	P – podsumowująca: P2- egzamin pisemny

22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:		
Nr efektu	Treści programowe	Sposób oceny
01	W1-W8-C1-C8	F3, P2
02	W1-W8-C1-C8	F3, P2
03	C1-C8	F3, P2
04	C1-C8	F3, P2
05	W1-W8-C1-C8	F3, P2
06	W1-W8-C1-C8	F3, P2

23. Warunek zaliczenia przedmiotu:				
Uzyskanie pozytywnej oceny końcowej jest uzależnione od pozytywnych ocen z śródsesemestralnych sprawdzianów oraz egzaminu pisemnego. Obowiązująca skala ocen to:				
Dostateczny	Dostateczny plus	Dobry	Dobry plus	Bardzo dobry
50-59%	60-69%	70-79%	80-89%	90-100%

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

Ogółem stacjonarne	Ogółem niestacjonarne	stacjonarne	niestacjonarne
75 h	75 h	3 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego		1,8 ECTS	1,2 ECTS
- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy		1,2 ECTS	1,8 ECTS
25. Wykaz literatury podstawowej <i>(wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)</i>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Kołos W., Chemia kwantowa, Warszawa 1986.</li> <li>2. Nalewajski R.F., Podstawy i metody chemii kwantowej, Warszawa 2001.</li> <li>3. Pielą L., Idea chemii kwantowej, Warszawa 2004.</li> </ol>			
26. Wykaz literatury uzupełniającej:			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Gumiński K., Petelenz P., Elementy chemii teoretycznej, Warszawa 1989.</li> <li>2. Matthews P.T., Wstęp do mechaniki kwantowej, Warszawa 1997.</li> <li>3. Hayward D., Mechanika kwantowa dla chemików, Warszawa 2007.</li> </ol>			