

**KAPITAŁ LUDZKI**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Komputer zamiast probówki		13.3.0819	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	wszystkie
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	wszystkie
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Piotr Skurski; dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 20 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 pkt. ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2023/2024 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
- Ćwiczenia laboratoryjne (pra-cownia komputerowa)		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		zaliczenie pisemne, testowe	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Uzyskanie pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego składającego się z pytań zamkniętych obejmujących wyłącznie zagadnienia wymienione w problematyce wykładu oraz uzyskanie pozytywnej oceny z ćwiczeń praktycznych odbywających się w pracowni komputerowej (ocena wystawiana na podstawie sprawozdań). Kryteria oceny zgodne z Regulaminem Studiów UG.	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej (K_BCh_W03), wskazuje i wybiera właściwe algorytmy i programy umożliwiające wykonanie obliczeń i rozwiązanie problemu (K_BCh_W04).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia stosując metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej (K_BCh_U04), dokonuje samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę zdobytą poza wykładem (K_BCh_U09).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Student pracuje w zespole; jest koleżeński, szanuje zwierzchnika i kolegów (K_BCh_K02)			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
Brak			

B. Wymagania wstępne Umiejętność obsługi komputera na poziomie podstawowym	
Cele kształcenia Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych	
Treści programowe A. Problematyka wykładu: podstawowe informacje zakresu zagadnień chemicznych i problemów, które mogą być rozwiązane przy użyciu metod obliczeniowych, rodzaje programów obliczeniowych, schemat posługiwania się pakietami obliczeniowymi, umiejętność zdefiniowania problemu do rozwiązania, umiejętność przeprowadzenia odpowiednich obliczeń, umiejętność poprawnej interpretacji uzyskanego wyniku i wyciągnięcia właściwych wniosków. B. Problematyka ćwiczeń: 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, hiperpolaryzowalności, 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.	
Wykaz literatury A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu): brak (stosowane są źródła on-line) B. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć praktycznych (konstrukcji sprawozdań): brak (stosowane są źródła on-line)	
Kierunkowe efekty uczenia się K_BCh_W03 opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych K_BCh_W04 opisuje rolę eksperymentu i symulacji komputerowych w procesie projektowania zagadnień inżynierskich K_BCh_U04 w toku realizacji zadań inżynierskich stosuje metody statystyczne, techniki informatyczne oraz wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do opisu procesów chemicznych i danych eksperymentalnych K_BCh_U09 wykorzystując nabytą wiedzę, umiejętności oraz różnorodne źródła informacji naukowej samodzielnie przygotowuje prace pisemne oraz wystąpienia ustne K_BCh_K02 pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i samodzielność w działaniach oraz efektywnie współdziała w zespole, pełniąc w nim różne role	Wiedza Definiuje zagadnienia chemiczne możliwe do rozwiązania na drodze teoretycznej, wyjaśnia podejście teoretyczne stosowane do rozwiązania konkretnych problemów chemicznych, opisuje sposób przygotowania danych oraz interpretacji wyników, charakteryzuje metody obliczeniowe stosowane wspólnie do przewidywania struktury i właściwości fizykochemicznych molekuł oraz badania mechanizmów reakcji chemicznych. Umiejętności Klasyfikuje dowolny problem chemiczny pod kątem możliwości jego rozwiązania na drodze teoretycznej, ocenia właściwości fizykochemiczne i spektralne molekuł przy użyciu metod obliczeniowych, ocenia mechanizm i przebieg reakcji chemicznej na podstawie wyznaczonych barier aktywacyjnych oraz parametrów charakteryzujących szybkość procesu Kompetencje społeczne (postawy) Rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje.
Kontakt piotr.skurski@ug.edu.pl	