


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wykład dyplomowy - Rozmowy o strukturze molekuł: od chmur elektronowych do makrocząsteczek biologicznych		13.3.0470	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia kosmetyków, analityka i diagnostyka
		specjalnościowy	chemiczna, chemia żywności
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		2	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 15 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2024/2025 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Uzyskanie wymaganej (51%, zgodnie z Regulaminem Studiów) suma-rycznej liczby punktów z kolokwium pisemnych.	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student rozwiązuje zadania, związane z właściwościami pierwiastków i związków chemicznych oraz ich analizą (K_W02); w testach wskazuje związek pomiędzy strukturą substancji chemicznych a ich właściwościami (K_W03).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Podczas rozwiązywania zadań obliczeniowych oraz problemów praktycznych, student stosuje dotychczas zdobytą wiedzę z zakresu chemii, przedstawia prezentację/wypowiedź na zadany temat, dotyczący chemii obliczeniowej (K_U08).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Podczas opracowywania wyników badań oraz problemów teoretycznych, student potrafi wskazać braki w swojej wiedzy i uzupełnić je, wyszukując i cytując literaturę przedmiotu (K_K01)			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
(przedmioty, których wcześniejsze zaliczenie jest niezbędne): matematyka, fizyka, chemia kwantowa			
B. Wymagania wstępne			

elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego	
Cele kształcenia	
Przedstawienie studentom wybranych metod <i>ab initio</i> i dynamiki molekularnej w badaniu podstawowych problemów chemicznych; Zaznajomienie studentów z współczesnymi zastosowaniami chemii kwantowej.	
Treści programowe	
Problematyka wykładu: Wybrane metody półempiryczne i <i>ab initio</i> w badaniu podstawowych problemów chemicznych. Jednoelektronowe bazy funkcyjne. Korelacja elektronowa. Badanie mechanizmów reakcji. Przykłady współczesnych zastosowań chemii kwantowej. Struktury peptydów i białek. Wstęp do modelowania molekularnego - od eksperymentu do struktury przestrzennej białek.	
Wykaz literatury	
A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu): Lucjan Piela „Idee chemii kwantowej” P.W. Atkins „Molekularna mechanika kwantowa”	
Kierunkowe efekty uczenia się	Wiedza
	Umiejętności
	Kompetencje społeczne (postawy)
K_W02 opisuje w zaawansowany sposób właściwości pierwiastków i najważniejszych związków chemicznych, wymienia metody ich otrzymywania oraz sposoby analizy; K_W03 wyjaśnia w zaawansowany sposób zależności pomiędzy strukturą materii a jej obserwowanymi właściwościami; K_U08 przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii; K_K01 identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego doskonalenia się oraz rozwoju osobistego;	opisuje podstawowe właściwości fizyczne najważniejszych związków chemicznych; wymienia najważniejsze metody chemii obliczeniowej; wymienia podstawowe bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach chemicznych; wyjaśnia zależności pomiędzy strukturą materii a jej obserwowanymi właściwościami.
	planuje właściwy dobór metody obliczeniowej w przypadku różnych cząsteczek chemicznych.
	rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje
Kontakt	
iwona.anusiewicz@ug.edu.pl	