


KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt 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			
null			
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; prof. UG, dr hab. Iwona Anusiewicz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			3 zajęcia - 45 godz. konsultacje - 10 godz. praca własna studenta - 45 godz. RAZEM: 50 godz. - 4 pkt. ECTS
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2019/2020 zimowy			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
fakultatywny (do wyboru)	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
	Sposób zaliczenia		
	Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
	egzamin pisemny testowy		
	Podstawowe kryteria oceny		
	Uzyskanie pozytywnej oceny z egzaminu 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).		
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Poprawnie rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej (K_BCh_W03), potrafi wskazać i wybrać 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 poprawnie opanowane metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej (K_BCh_U04), potrafi dokonać samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę zdobytą poza wykładem (K_BCh_U09).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Student sprawnie 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 liczbowa i graficzna interpretacja 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 molekuly, 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)	
Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe) K_BCh_W03 opisuje 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 podstawowe 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 współcześnie 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	