

## KARTA MODUŁU (sylabus)

|  |   |   |
|--|---|---|
| 1. Nazwa modułu: <b>CHEMIA OBLICZENIOWA</b>  |   | 2. punkty ECTS  |
|  |   | <b>5</b>  |
|  |   | 3. kod ECTS   |
|  |   | <b>S/N2CHEMII-O-ChemOBL-I</b>   |
| 4. Kierunek studiów: <b>CHEMIA</b>   | 5. Ścieżka kształcenia: -   |   |
| 6. Semestr studiów: <b>I</b>   | 7. Stopień: <b>studia II stopnia</b>  |   |
| 8. Forma studiów: <b>studia stacjonarne/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 kierunkowego</b>   |   |   |
| 13. Forma zajęć  | 14. Metody dydaktyczne  | 15. Sposób realizacji zajęć   |
| <b>wykład</b>  | <b>wykład z prezentacją multimedialną/<br/>wykład konwersatoryjny</b>   | <b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>  |
| <b>ćwiczenia audytoryjne</b>   | <b>ćwiczenia audytoryjne: analiza przypadków/ dyskusja/ rozwiązywanie zadań z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania [HyperChem, ChemSketch, PQStat, GrapMate, Statistica]</b> | <b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych/ zajęcia prowadzone w salach komputerowych</b> |
| 16. Cele i zadania modułu:<br>1. <b>Przekazanie studentom wiedzy z zakresu metod obliczeniowych właściwych dla chemii, ze szczególnym uwzględnieniem narzędzi informatycznych.</b> |   |   |
| 17. Wymagania formalne:<br>1. <b>Obecność na zajęciach organizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych.</b>  |   |   |
| 18. Wymagania wstępne:<br>1. <b>Usystematyzowana wiedza matematyczna.</b>  |   |   |
| 19. Treści programowe:   |   |   |
| lp.  | <b>W - wykład / C - ćwiczenia:</b>  |   |
| <b>W1/<br/>C1</b>  | Wprowadzenie do modułu: teorie chemiczne, a chemia obliczeniowa. Rozwój chemii obliczeniowej w Polsce i na świecie.   |   |
| <b>W2/<br/>C2</b>  | Typy metod obliczeniowych mających zastosowanie w chemii. Rozwój poglądów na budowę atomu i cząsteczki.   |   |
| <b>W3/<br/>C3</b>  | Wprowadzenie do metod chemii kwantowej – podstawy teoretyczne do kontynuacji kształcenia w kolejnych semestrach -> moduły tj. Chemia kwantowa oraz Modelowanie molekularne w praktyce.  |   |
| <b>W4/<br/>C4</b>  | Wprowadzenie do mechaniki molekularnej – podstawy teoretyczne do kontynuacji kształcenia w kolejnych semestrach -> moduły tj. Chemia kwantowa oraz Modelowanie molekularne w praktyce.  |   |
| <b>W5/<br/>C5</b>  | Określenie geometrii cząsteczki. Optymalizacja geometrii – metody. Właściwości zoptymalizowanych struktur.  |   |
| <b>W6/<br/>C6</b>  | Metody dynamiczne. Równanie ruchu Newtona. Symulacje dynamiki molekularnej. Symulacje Monte Carlo – wprowadzenie i ćwiczenia.   |   |
| <b>W7/<br/>C7</b>  | Stałe szybkości i równowagi. Termodynamika statystyczna i równowaga. Teoria stanu przejściowego – wprowadzenie i ćwiczenia.   |   |
| <b>W8/<br/>C8</b>  | Metody hybrydowe i wieloskalowe – wprowadzenie i ćwiczenia.   |   |

|  |   |   |            |              |
|--|---|---|------------|--------------|
| W9/<br>CW9   | Chemia obliczeniowa w pracy eksperymentalnej. Planowanie projektu obliczeniowego.   |   |            |              |
| W10/<br>C10  | Podstawowe programy do wizualizacji i edycji danych obliczeniowych - wprowadzenie do kontynuacji kształcenia w kolejnych semestrach -> moduł tj. Modelowanie molekularne w praktyce |   |            |              |
| 20. Zakładane efekty uczenia się:  |   |   |            |              |
| <b>Wiedza:</b> <i>zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>   |   |   |            |              |
| Nr efektu  | Efekt uczenia się - WIEDZA  |   |            |              |
|  | Student, który zaliczył moduł:  |   |            |              |
| 01   | zna i definiuje pojęcia, zagadnienia i metody z obszaru chemii obliczeniowej.   |   |            |              |
| 02   | posiada wiedzę nt. dostępnych narzędzi informatycznych wykorzystywanych w chemii obliczeniowej.   |   |            |              |
| <b>Umiejętności:</b> <i>zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>   |   |   |            |              |
| Nr efektu  | Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI  |   |            |              |
|  | Student, który zaliczył moduł:  |   |            |              |
| 03   | potrafi prawidłowo dobrać metodę obliczeniową do analizowanego zagadnienia  |   |            |              |
| 04   | potrafi samodzielnie przeprowadzić obliczenia z wykorzystaniem metod mających zastosowanie w chemii oraz prawidłowo zinterpretować wyniki.  |   |            |              |
| <b>Kompetencje społeczne:</b> <i>zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania</i> |   |   |            |              |
| Nr efektu  | Efekt uczenia się - KOMPETENCJE   |   |            |              |
|  | Student, który zaliczył moduł:  |   |            |              |
| 05   | jest świadomy własnych ograniczeń i rozumie potrzebę ustawicznego pogłębiania swojej wiedzy.  |   |            |              |
| 06   | potrafi samodzielnie sformułować problem i poszukiwać jego rozwiązania samodzielnie, bądź we współpracy z grupą.  |   |            |              |
| 20a. Odniesienie modułowych efektów uczenia się do kierunkowych efektów uczenia się:   |   |   |            |              |
| Nr efektu modułowego   |   | Symbol EKK  |            |              |
| 01   |   | KK2P_W03  |            |              |
| 02   |   | KK2P_W03  |            |              |
| 03   |   | KK2P_U07  |            |              |
| 04   |   | KK2P_U07  |            |              |
| 05   |   | KK2P_K01  |            |              |
| 06   |   | KK2P_K04  |            |              |
| 21. Sposoby oceny:   |   |   |            |              |
| F – formująca:<br>F3-sprawdzian  |   | P – podsumowująca:<br>P2-egzamin pisemny<br>P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru |            |              |
| 22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:  |   |   |            |              |
| Nr efektu  | Treści programowe   | Sposób oceny  |            |              |
| 01   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 02   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 03   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 04   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 05   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 06   | W1-W10, C1-C10  | F3, P2, P3  |            |              |
| 23. Warunek zaliczenia modułu:   |   |   |            |              |
| Ocenę z zaliczenia stanowi średnią ocen zdobytych w czasie semestr za: sprawdziany śródsesemestralne [dotyczy ćwiczeń audytoryjnych].  |   |   |            |              |
| Obowiązująca skala ocen z sprawdzianów i egzaminów 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 |
|---|-----------------------|-------------|----------------|
| 125 h   | 125 h                 | 5 ECTS      |                |
| - w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego                     |                       | 1,8 ECTS    | 1,12 ECTS      |
| - w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy  |                       | 3,2 ECTS    | 3,88 ECTS      |
| 25. Wykaz <b>literatury podstawowej</b> (wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)         |                       |             |                |
| 1. Kaczmarek-Kędziera A., Kędziera D., Ziegler-Borowska M., Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Toruń 2014. |                       |             |                |
| 2. Harvey J., Chemia obliczeniowa, Warszawa 2019.   |                       |             |                |
| 26. Wykaz <b>literatury uzupełniającej</b> :  |                       |             |                |
| 1. Cramer C.J., Essentials of Computational Chemistry, 2004.  |                       |             |                |
| 2. Pielak L., Idee Chemii Kwantowej, Warszawa 2021.   |                       |             |                |