KARTA PRZEDMIOTU

Kod przedmiotu	**0531-2CHEM-C01-CT**	
Nazwa przedmiotu w języku	polskim	***CHEMIA TEORETYCZNA***
	angielskim	***THEORETICAL CHEMISTRY***

1. USYTUOWANIE PRZEDMIOTU W SYSTEMIE STUDIÓW

1.1. Kierunek studiów	**Chemia**
1.2. Forma studiów	**stacjonarne / niestacjonarne**
1.3. Poziom studiów	**studia drugiego stopnia magisterskie**
1.4. Profil studiów	**ogólnoakademicki**
1.5. Osoba przygotowująca kartę przedmiotu	**dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK**
1.6. Kontakt	**pawel.rodziewicz@ujk.edu.pl**

2. OGÓLNA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU

2.1. Język wykładowy	**Polski**
2.2. Wymagania wstępne	**umiejętności w zakresie przedmiotów: Matematyka, Fizyka, Podstawy Chemii Kwantowej**

3. SZCZEGÓŁOWA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU

3.1. **Forma zajęć**		**stacjonarne: wykład 30, konwersatorium 15, laboratorium 30 niestacjonarne: wykład 20, konwersatorium 10, laboratorium 20**
3.2. **Miejsce realizacji zajęć**		**zajęcia w pomieszczeniu dydaktycznym UJK**
3.3. **Forma zaliczenia zajęć**		**wykład – egzamin, konwersatorium – zaliczenie z oceną, laboratorium – zaliczenie z oceną**
3.4. **Metody dydaktyczne**		**wykład konwersatoryjny, ćwiczenia przedmiotowe, dyskusja grupowa**
3.5. **Wykaz literatury**	**podstawowa**	**1. L. Piela, "Idee chemii kwantowej", PWN, 2012 2. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera "Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym", Wydawnictwo Naukowe UMK, 2014**
	uzupełniająca	**1. D. Hayward, "Mechanika kwantowa dla chemików", PWN, 2007**

4. CELE, TREŚCI I EFEKTY UCZENIA SIĘ

4.1. **Cele przedmiotu** *(z uwzględnieniem formy zajęć)*

Wykład:
C1. Poznanie podstaw wiedzy z chemii teoretycznej niezbędnych do zrozumienia właściwości atomów oraz cząsteczek
C2. Kształtowanie postawy krytycznej wobec pozyskiwanych informacji
Konwersatorium:
C1. Nabywanie umiejętności rachunkowych z zakresu chemii teoretycznej
C2 Kształtowanie krytycznej oceny elementów prowadzonego rozumowania
Laboratorium:
C1. Nabywanie umiejętności wykonywania obliczeń statycznych za pomocą metod obliczeniowych chemii teoretycznej: mechaniki molekularnej oraz mechaniki kwantowej
C2. Kształtowanie krytycznej oceny elementów prowadzonego rozumowania

4.2. **Treści programowe** *(z uwzględnieniem formy zajęć)*

Wykład:
Równanie Schrödingera dla układów modelowych. Przybliżenie jednoelektronowe oraz adiabatyczne. Metoda Hartree-Fock'a (HF). Metody posthartree-fockowskie (post-HF). Teoria funkcjonału gęstości (DFT). Metody półempiryczne. Struktura elektronowa atomów wieloelektronowych i cząsteczek dwuatomowych. Bazy funkcyjne. Hiperpowierzchnia energii potencjalnej. Optymalizacja geometrii. Energia oddziaływania oraz energia wiązania. Klasyfikacja orbitali i hybrydyzacja. Mechanika molekularna. Pola siłowe. Periodyczne warunki brzegowe. Metody dynamiki molekularnej: klasyczna oraz ab initio.

Konwersatorium:
Wartości oraz wektory własne. Normalizacja wektorów własnych. Ortogonalizacja wektorów własnych metodą Grama-Schmidta. Analiza funkcji Slatera i Gaussa. Konstrukcja baz funkcyjnych. Potencjały oddziaływań międzyatomowych oraz międzycząsteczkowych. Moc oddziaływań wiążących oraz niewiążących.

Laboratorium:
Budowa modeli (3D) cząsteczek chemicznych. Współrzędne kartezjańskie a współrzędne wewnętrzne. Przygotowanie pliku wejściowego (input) do obliczeń. Uruchamianie programu do obliczeń. Analiza danych zawartych w pliku wyjściowym (output). Wizualizacja orbitali atomowych oraz cząsteczkowych. Analiza konformacyjna. Analiza minimów energii: globalne oraz lokalne. Obliczanie energii wiązania oraz energii oddziaływania. Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych. Obliczanie parametrów spektroskopowych. Wizualizacja ciała stałego. Periodyczne warunki brzegowe. Analiza trajektorii otrzymanych z symulacji metodą dynamiki molekularnej. Radialna funkcja rozkładu. Wizualizacja danych z bazy PDB.

4.3. Przedmiotowe efekty uczenia się

Efekt	Student, który zaliczył przedmiot	Odniesienie do kierunkowych efektów uczenia się
	w zakresie **WIEDZY:**	
W01	ma poszerzoną wiedzę z zakresu metod posthartee-fockowskich (post-HF), teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz mechaniki molekularnej	CHEM2A_W07
W02	ma poszerzoną wiedzę z zakresu optymalizacji geometrii cząsteczek oraz analizy hiperpowierzchni energii potencjalnej	CHEM2A_W07
	w zakresie **UMIEJĘTNOŚCI:**	
U01	Potrafi wykorzystać obliczenia chemii teoretycznej do opisu oddziaływań, w szczególności obliczeń energii oddziaływania oraz wiązania	CHEM2A_U04
U02	Potrafi wykorzystać prawa chemii teoretycznej do opisu energii atomu oraz cząsteczek a także obliczać wartości oraz wektory własne	CHEM2A_U04
	w zakresie **KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH:**	
K01	Jest gotów do uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych	CHEM2A_K01

4.4. Sposoby weryfikacji osiągnięcia przedmiotowych efektów uczenia się

Efekty przedmiotowe *(symbol)*	Sposób weryfikacji (+/-)																				
	~~Egzamin ustny~~/pisemny*			Kolokwium*			~~Projekt*~~			Aktywność na zajęciach*			~~Praca własna~~*			~~Praca w grupie~~*			~~Inne~~ *(jakie?)**		
	Forma zajęć			*Forma zajęć*			*Forma zajęć*			*Forma zajęć*			*Forma zajęć*			*Forma zajęć*			*Forma zajęć*		
	W	*C*	...	*W*	*C*	*K*	*W*	*C*	...	*W*	*C*	*K*	*W*	*C*	...	*W*	*C*	...	*W*	*C*	...
W01	+																				
W02	+																				
U01	+				+	+															
U02	+				+	+															
K01											+	+									

**niepotrzebne usunąć*

4.5. Kryteria oceny stopnia osiągnięcia efektów uczenia się

Forma zajęć	Ocena	Kryterium oceny
wykład (W)	3	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów
	3,5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów
Konwersatorium (K)	3	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów.
	3,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów
Laboratorium (L)	3	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów.
	3,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów

5. BILANS PUNKTÓW ECTS – NAKŁAD PRACY STUDENTA

Kategoria	Obciążenie studenta	
	Studia stacjonarne	Studia niestacjonarne
LICZBA GODZIN REALIZOWANYCH PRZY BEZPOŚREDNIM UDZIALE	*75*	*50*

NAUCZYCIELA /GODZINY KONTAKTOWE/		
Udział w wykładach	*30*	*20*
Udział w konwersatorium	*15*	*10*
Udział w laboratorium	*30*	*20*
SAMODZIELNA PRACA STUDENTA /GODZINY NIEKONTAKTOWE/	***75***	***100***
Przygotowanie do wykładu	*10*	*15*
Przygotowanie do konwersatorium	*20*	*25*
Przygotowanie do laboratorium	*15*	*20*
Przygotowanie do egzaminu/kolokwium	*30*	*40*
ŁĄCZNA LICZBA GODZIN	***150***	***150***
PUNKTY ECTS za przedmiot	**6**	**6**

Przyjmuję do realizacji *(data i czytelne podpisy osób prowadzących przedmiot w danym roku akademickim)*

1.10.2023 Paweł Rodzoch