

KARTA PRZEDMIOTU

Kod przedmiotu	0531.6.CHEM.2.B/C.CT	
Nazwa przedmiotu w języku	polskim	CHEMIA TEORETYCZNA THEORETICAL CHEMISTRY
	angielskim	

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. Piel, "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

<p>4.1. Cele przedmiotu (z uwzględnieniem formy zajęć)</p> <p>Wykład: C1. Poznanie podstaw wiedzy z chemii teoretycznej niezbędnych do zrozumienia właściwości atomów oraz cząsteczek C2. Kształtowanie postawy krytycznej wobec pozyskiwanych informacji</p> <p>Konwersatorium: C1. Nabywanie umiejętności rachunkowych z zakresu chemii teoretycznej C2 Kształtowanie krytycznej oceny elementów prowadzonego rozumowania</p> <p>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</p>	<p>4.2. Treści programowe (z uwzględnieniem formy zajęć)</p> <p>Wykład: Równanie Schrödingera dla układów modelowych. Przybliżenie jednoelektronowe oraz adiabatyczne. Metoda Hartree-Fock'a (HF). Metody posthartree-fockowskie (post-HF). Teoria funkcjonatu 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.</p> <p>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.</p> <p>Laboratorium: Budowa modeli (3D) cząsteczek chemicznych. Współrzędne kartezyjskie 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.</p>
---	---

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 postharte-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
U03	Potrafi efektywnie koordynować pracę zespołu badawczego lub współpracować z innymi naukowcami, biorąc pod uwagę indywidualne umiejętności i potrzeby każdego członka zespołu, w celu osiągnięcia wyznaczonych celów naukowych. Jest zdolny do skutecznego delegowania zadań i wspierania rozwoju umiejętności członków zespołu.	CHEM2A_U10
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	L	K	W	L	K	W	L	K	W	L	K	W	L	K	W	L	K	W	L	K
W01	+																				
W02	+																				
U01	+				+	+															
U02	+				+	+															
U03											+	+									
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 NAUCZYCIELA /GODZINY KONTAKTOWE/	75	50
Udział w wykładach	30	20
Udział w konwersatorium	15	10
Udział w laboratorium	30	20
SAMODZIELNA PRACA STUDENTA /GODZINY NIEKONTAKTOWE/	50	75
Przygotowanie do wykładu	5	5
Przygotowanie do konwersatorium	15	25
Przygotowanie do laboratorium	10	15
Przygotowanie do egzaminu/kolokwium	20	30
ŁĄCZNA LICZBA GODZIN	125	125
PUNKTY ECTS za przedmiot	5	5

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