

|    |                           |  |
|----|---------------------------|--|
| 1. | Nazwa kierunku            | chemia   |
| 2. | Wydział                   | Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych   |
| 3. | Cykl rozpoczęcia          | 2021/2022 (semestr zimowy), 2022/2023 (semestr zimowy), 2023/2024 (semestr zimowy) |
| 4. | Poziom kształcenia        | studia drugiego stopnia  |
| 5. | Profil kształcenia        | ogólnoakademicki   |
| 6. | Forma prowadzenia studiów | stacjonarna  |

**Moduł kształcenia:** Chemia teoretyczna

**Kod modułu:** W4-CH-S2-1-CHT

**1. Liczba punktów ECTS:** 6

| 2. Zakładane efekty uczenia się modułu |  |                             |                                |
|--|--|-----------------------------|--------------------------------|
| kod                                    | opis   | efekty uczenia się kierunku | stopień realizacji (skala 1-5) |
| W4-CH-S2-1-CHT_1                       | Zna podstawowe klasy metod obliczeniowych: DFT (związane z pojęciem gęstości elektronowej) i WFT (związane z pojęciem funkcji falowej) | CH_W01<br>CH_W06            | 3<br>5                         |
| W4-CH-S2-1-CHT_10                      | Umie scharakteryzować konfiguracje i stany elektronowe.  | CH_U02                      | 2                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_11                      | Umie zastosować metody obliczeniowe chemii kwantowej do opisu oddziaływań międzycząsteczkowych.  | CH_U02                      | 3                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_12                      | Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii                        | CH_K01                      | 2                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_2                       | Rozumie rolę przybliżenia jednoelektronowego w metodach kwantowochemicznych. Zna metodę Hartree-Focka.                                 | CH_W06                      | 4                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_3                       | Zna pojęcie korelacji elektronowej i potrafi wskazać metody obliczeniowe uwzględniające efekty korelacyjne.                            | CH_W06                      | 3                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_4                       | Zna metodę DFT w ujęciu Kohna-Shama.   | CH_W06                      | 4                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_5                       | Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek.                                   | CH_W03                      | 4                              |
| W4-CH-S2-1-CHT_6                       | Zna obowiązujące teorie wyjaśniające naturę oddziaływań międzycząsteczkowych oraz potrafi je scharakteryzować i sklasyfikować          | CH_W01<br>CH_W05            | 2<br>3                         |
| W4-CH-S2-1-                            | Umie zastosować wybrane programy dostępne w pakietach komercyjnych do obliczeń w zakresie chemii kwantowej                             | CH_U02                      | 3                              |

|                  |   |        |   |
|------------------|---|--------|---|
| CHT_7            |   |        |   |
| W4-CH-S2-1-CHT_8 | Umie zastosować metody kwantowochemiczne do badania struktury i energetyki molekularnej | CH_U02 | 5 |
| W4-CH-S2-1-CHT_9 | Umie wybrać i dostosować bazy funkcyjne do realizowanych obliczeń                       | CH_U02 | 3 |

|                          |   |
|--------------------------|---|
| <b>3. Opis modułu</b>    |   |
| <b>Opis</b>              | Moduł Chemia teoretyczna ma za zadanie zapoznanie studentów z ważniejszymi pojęciami chemii teoretycznej, w szczególności wyrobienie umiejętności posługiwania się chemią obliczeniową jako metodą alternatywną do badań eksperymentalnych. Główny akcent kładzie się na zastosowanie metod chemii kwantowej, na różnych poziomach dokładności, do określania charakterystyki spektralnej i właściwości związków chemicznych oraz do opisu struktury połączeń chemicznych na gruncie chemii teoretycznej. |
| <b>Wymagania wstępne</b> | Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego.  |

| <b>4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu</b> |              |  |  |
|--|--------------|--|--|
| kod  | nazwa (typ)  | opis   | efekty uczenia się modułu  |
| W4-CH-S2-1-CHT_w_1                                       | egzamin      | Egzamin (pisemny lub ustny do wyboru przez studentów na pierwszym wykładzie) weryfikujący wiedzę w oparciu o treści wykładów i ćwiczeń oraz wskazaną w sylabusie literaturę. | W4-CH-S2-1-CHT_1, W4-CH-S2-1-CHT_10, W4-CH-S2-1-CHT_11, W4-CH-S2-1-CHT_2, W4-CH-S2-1-CHT_4, W4-CH-S2-1-CHT_5, W4-CH-S2-1-CHT_6, W4-CH-S2-1-CHT_7, W4-CH-S2-1-CHT_3 |
| W4-CH-S2-1-CHT_w_2                                       | kolokwium    | Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej.  | W4-CH-S2-1-CHT_1, W4-CH-S2-1-CHT_8, W4-CH-S2-1-CHT_3   |
| W4-CH-S2-1-CHT_w_3                                       | sprawozdanie | Ocena poprawności wykonania obliczeń i interpretacji wyników.  | W4-CH-S2-1-CHT_10, W4-CH-S2-1-CHT_11, W4-CH-S2-1-CHT_12, W4-CH-S2-1-CHT_7, W4-CH-S2-1-CHT_8, W4-CH-S2-1-CHT_9  |

| <b>5. Rodzaje prowadzonych zajęć</b> |                           |  |               |  |               |   |
|--------------------------------------|---------------------------|--|---------------|--|---------------|---|
| kod                                  | rodzaj prowadzonych zajęć |  |               | praca własna studenta  |               | sposoby weryfikacji efektów uczenia się |
|                                      | nazwa                     | opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)  | liczba godzin | opis   | liczba godzin |   |
| W4-CH-S2-1-CHT_fs_1                  | wykład                    | Wykład omawiający zagadnienia chemii teoretycznej z użyciem środków audiowizualnych. | 30            | Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie. | 20            | W4-CH-S2-1-CHT_w_1                      |
| W4-CH-S2-1-                          | laboratorium              | Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące   | 45            | Przygotowanie teoretyczne do zajęć z   | 55            |   |

|          |  |                               |  |  |  |  |
|----------|--|-------------------------------|--|--|--|--|
| CHT_fs_2 |  | obliczenia kwantowochemiczne. |  | tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie obliczeń kwantowochemicznych. Przygotowanie sprawozdań. |  | W4-CH-S2-1-CHT_w_2, W4-CH-S2-1-CHT_w_3 |
|----------|--|-------------------------------|--|--|--|--|