

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

Moduł kształcenia: Chemia kwantowa

Kod modułu: W4-CB-S2-1-CK

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
W4-CB-S2-1-CK_1	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek.	CH_W01	3
W4-CB-S2-1-CK_10	Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych.	CH_K01 CH_K04	5 4
W4-CB-S2-1-CK_2	Zna podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w tym metod funkcji falowej, metody DFT i mechaniki molekularnej.	CH_W06	5
W4-CB-S2-1-CK_3	Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek.	CH_W03	4
W4-CB-S2-1-CK_4	Zna pojęcie funkcji rozdziału i podstawowe pojęcia termodynamiki.	CH_W05	3
W4-CB-S2-1-CK_5	Potrafi opisać przebieg reakcji chemicznej na gruncie chemii kwantowej.	CH_W05	3
W4-CB-S2-1-CK_6	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe.	CH_W01	3
W4-CB-S2-1-CK_7	Umie zastosować metody chemii kwantowej, zawarte w dostępnych pakietach obliczeniowych, do badania struktury, reaktywności, oddziaływań międzycząsteczkowych i właściwości spektroskopowych związków chemicznych.	CH_U02	3
W4-CB-S2-1-CK_8	Umie wyznaczyć energię, entropię oraz potencjały termodynamiczne na poziomie molekularnym.	CH_U02	3
W4-CB-S2-1-CK_9	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii.	CH_K01	3

3. Opis modułu

Opis	Moduł Chemia kwantowa ma za zadanie zapoznanie studentów z ważniejszymi pojęciami chemii teoretycznej, w szczególności wyrobienie umiejętności posługiwania się metodami chemii kwantowej, termodynamiki statystycznej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej do określania struktury, charakterystyki spektralnej i właściwości związków chemicznych jak również opisu reakcji chemicznych na gruncie chemii teoretycznej.
Wymagania wstępne	Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego.

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu

kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
W4-CB-S2-1-CK_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-CB-S2-1-CK_1, W4-CB-S2-1-CK_10, W4-CB-S2-1-CK_2, W4-CB-S2-1-CK_3, W4-CB-S2-1-CK_4, W4-CB-S2-1-CK_5, W4-CB-S2-1-CK_6
W4-CB-S2-1-CK_w_2	kolokwium	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej.	W4-CB-S2-1-CK_1, W4-CB-S2-1-CK_2, W4-CB-S2-1-CK_3, W4-CB-S2-1-CK_4, W4-CB-S2-1-CK_6
W4-CB-S2-1-CK_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania projektu obliczeniowego.	W4-CB-S2-1-CK_7, W4-CB-S2-1-CK_8, W4-CB-S2-1-CK_9
W4-CB-S2-1-CK_w_4	ocenianie ciągle	Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium.	W4-CB-S2-1-CK_7, W4-CB-S2-1-CK_8, W4-CB-S2-1-CK_9

5. Rodzaje prowadzonych zajęć

kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów uczenia się
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
W4-CB-S2-1-CK_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.	10	W4-CB-S2-1-CK_w_1
W4-CB-S2-1-CK_fs_2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne.	45	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie obliczeń kwantowochemicznych .	40	W4-CB-S2-1-CK_w_2, W4-CB-S2-1-CK_w_3, W4-CB-S2-1-CK_w_4