

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

7. Informacje podstawowe o module	
Nazwa modułu	Modelowanie molekularne
Kod modułu	W4-CH3-S2-2-MM
Liczba punktów ECTS	5
Język wykładowy	polski
Cel i opis treści kształcenia	<p>Moduł "Modelowanie molekularne" ma na celu pogłębienie wiedzy i umiejętności osób studiujących w zakresie chemii teoretycznej, skupiając się przede wszystkim na rozwijaniu ich umiejętności korzystania z chemii obliczeniowej jako zaawansowanej metody badawczej, alternatywnej wobec tradycyjnych eksperymentów. Centralnym punktem modułu są metody kwantowochemiczne, stanowiące kluczowe narzędzie w analizie różnorodnych aspektów chemicznych na poziomie zaawansowanym.</p> <p>Poprzez poruszane zagadnienia związane m.in. z modelowaniem reakcji chemicznych, oddziaływań międzycząsteczkowych czy opisem procesów utleniania i redukcji, moduł ma na celu rozwinięcie praktycznych umiejętności studentów w korzystaniu z zaawansowanych technik chemii obliczeniowej, szczególnie metod kwantowochemicznych.</p>
Lista modułów koniecznych do zaliczenia przed przystąpieniem do tego modułu (o ile to konieczne)	nie dotyczy

8. Zakładane efekty uczenia się modułu			
Kod	Opis	Efekty uczenia się kierunku	Stopień realizacji (skala 1-5)
W4-CH3-S2-2-MM_1	Zna podstawowe klasy metod obliczeniowych: DFT (związane z pojęciem gęstości elektronowej) i WFT (związane z pojęciem funkcji falowej)	CH_W01 CH_W06	3 5
W4-CH3-S2-2-MM_2	Umie zastosować metody obliczeniowe chemii kwantowej do opisu oddziaływań międzycząsteczkowych.	CH_U02	3
W4-CH3-S2-2-MM_3	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii	CH_K01	2
W4-CH3-S2-2-MM_4	Umie zastosować wybrane programy dostępne w pakietach komercyjnych do obliczeń w zakresie chemii kwantowej	CH_U02	3
W4-CH3-S2-2-MM_5	Zna metody kwantowochemiczne i umie je zastosować do: modelowania reakcji chemicznych; opisu stanu przejściowego i wyznaczania geometrii tego stanu; modelowania oddziaływań molekuly w układzie wielocząsteczkowym; opisów procesów utlenienia i redukcji, procesów przeniesienia protonu, oddziaływania molekuly z fotonem	CH_U02 CH_U08 CH_W06	5 2 5

9. Metody prowadzenia zajęć		
Kod	Kategoria	Nazwa (opis)
a01	Zbiór metod asymilacji wiedzy / podających	Wykład informacyjny/kursowy systematyczny kurs z określonej dyscypliny naukowej w ujęciu syntetycznym; realizacja zakłada bierny odbiór przekazanych informacji
b01	Zbiór metod problemowych	Wykład problemowy analiza wybranego problemu naukowego lub praktycznego z weryfikacją i próbą rozwiązania wykładanych kwestii oraz wskazaniem konsekwencji wynikających z tego rozwiązania
b02	Zbiór metod problemowych	Wykład konwersatoryjny przekaz treści uwzględniający interakcję ze słuchaczami wykładu; dyskusja związana z wykładem stanowi jeden z jego elementów bądź jest jego kontynuacją
b09	Zbiór metod problemowych	Metody aktywizujące: flipped classroom nauczanie wyprzedzające; praca na zajęciach opiera się na uprzednio samodzielnie przestudiowanym materiale wskazanym przez prowadzącego zajęcia; przygotowanie poza zajęciami służy poznaniu zagadnień stanowiących warunek uczestnictwa w dyskusji oraz ćwiczenia powiązanych z nimi umiejętności praktycznych; ciężar aktywności opiera się na pracy studentów z towarzyszeniem prowadzącego zajęcia
c07	Zbiór metod eksponujących	Prezentacja mechaniczne przedstawienie syntetycznego obrazu treści w formie grafiki prezentacyjnej, np. szeregu slajdów lub innych form multimedialnych zwykle z omówieniem/innym komentarzem; typowe składniki prezentacji - tekst ujęty w punkty, wykresy, grafika (obrazy) i animacje; ew. efekty dźwiękowe lub muzyka; ilustracja multimedialna treści zajęć prezentowana w formie rzutowanego obrazu
d01	Zbiór metod programowanych	Praca z komputerem np. Webquest - realizacja zadań edukacyjnych z wykorzystaniem urządzeń elektronicznych, cyfrowych, programów komputerowych i aplikacji internetowych; NA pełni funkcję konsultanta; praca studentów przebiega według określonego przez osobę prowadzącą zajęcia planu z uwzględnieniem etapów i instrukcji oraz zmierza do wypracowania wskazanych rezultatów w ustalonym terminie
d03	Zbiór metod programowanych	Praca z innym narzędziem dydaktycznym np. z wykorzystaniem stron internetowych w dowolny sposób lub wg reguł ustalonych przez prowadzącego zajęcia; lub inne, specyficzne dla przedmiotu studiów
e01	Zbiór metod praktycznych	Ćwiczenie laboratoryjne/doświadczenie [w tym, w terenie] metoda praktycznego stosowania wiedzy; realizowana w trzech fazach: dostrzeżenie problemu wywołanego treścią zadania, sformułowanie problemu i próba samodzielnego rozwiązania z oceną skutków; celem jest zdobycie umiejętności, sprawności i nawyków oraz utrwalenie posiadanych wiadomości, tak aby wiedza stała się wiedzą operatywną; metoda laboratoryjna zakłada większą niż przeprowadzenie doświadczenia samodzielność uczących się

10. Formy prowadzonych zajęć					
Kod	Nazwa	Liczba godzin	Sposób weryfikacji efektów uczenia się	Efekty uczenia się modułu	Metody prowadzenia zajęć
W4-CH-S2-2-MM_fs_1	wykład	30	egzamin	W4-CH3-S2-2-MM_1, W4-CH3-S2-2-MM_2, W4-CH3-S2-2-MM_3, W4-CH3-S2-2-MM_4, W4-CH3-S2-2-MM_5	a01, b01, b02
W4-CH-S2-2-MM_fs_2	laboratorium	45	zaliczenie	W4-CH3-S2-2-MM_1, W4-CH3-S2-2-MM_2, W4-CH3-S2-2-	b09, c07, d01, d03, e01

			MM_3, W4-CH3-S2-2-MM_4, W4-CH3-S2-2-MM_5	
11. Praca studenta poza udziałem w zajęciach obejmuje w szczególności:				
Kod	Kategoria	Nazwa (opis)	Czy częściowo zalicza się do BUNA-y?	
a01	Przygotowanie do zajęć	Kwerenda materiałów i przegląd działań niezbędnych do uczestnictwa w zajęciach <i>przegląd literatury, dokumentacji, narzędzi i materiałów oraz specyfiki i zakresu działań wskazanych w sylabusie jako wymagane do pełnego uczestnictwa w zajęciach</i>	Nie	
a03	Przygotowanie do zajęć	Ćwiczenie praktycznych umiejętności <i>czynności polegające na powtarzaniu, doskonaleniu i utrwalaniu praktycznych umiejętności, w tym ćwiczonych podczas odbytych wcześniej zajęć lub nowych, niezbędnych z punktu widzenia realizacji kolejnych elementów programu (jako przygotowanie się uczestnictwa w zajęciach)</i>	Nie	
b01	Konsultowanie programu i organizacji zajęć	Zapoznanie się z zapisami sylabusa <i>przeglądanie zawartości sylabusa i zapoznanie się z treścią jego zapisów</i>	Tak	
c01	Przygotowanie do weryfikacji efektów uczenia się	Ustalanie etapów realizacji zadań przyczyniających się do weryfikacji efektów uczenia się <i>przygotowanie strategii realizacji zadania uwzględniającej podział treści, czynności i ich zakres, czas realizacji oraz/lub sposób pozyskania niezbędnych do jego wykonania materiałów i narzędzi, itp.</i>	Tak	
d01	Konsultowanie wyników weryfikacji efektów uczenia się	Analiza korekt/informacji zwrotnej ze strony NA dotyczących wyników wer. ef. ucz. <i>przegląd uwag, ocen i opinii sporządzonych przez NA odnoszących się do realizacji zadania sprawdzającego poziom osiągniętych efektów uczenia się</i>	Tak	
d02	Konsultowanie wyników weryfikacji efektów uczenia się	Opracowanie planu korekty i zadań uzupełniających/korygujących <i>przegląd i wybór zadań oraz czynności pozwalających na eliminację wskazanych przez NA błędów, ich weryfikację lub poprawę oraz zaliczenie zadania na, co najmniej, najniższym dopuszczalnym poziomie</i>	Tak	

Informacje dotyczące szczegółów realizacji modułu w danym roku akademickim znajdują się w sylabusie dostępnym w systemie USOS: <https://usosweb.us.edu.pl>.