

1.	Nazwa kierunku	chemia
2.	Cykl rozpoczęcia	2016/2017 (semestr letni)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Chemia kwantowa

Kod modułu: 0310-CH-S2-B-ChK

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
0310-CH-S2-B-MM_1	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_10	Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych	CH_K06 CH_K08	4 5
0310-CH-S2-B-MM_2	Zna podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w tym metod funkcji falowej, metody DFT i mechaniki molekularnej	CH_W09	5
0310-CH-S2-B-MM_3	Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek	CH_W04	4
0310-CH-S2-B-MM_4	Zna pojęcie funkcji rozdziału i podstawowe pojęcia termodynamiki	CH_W07	3
0310-CH-S2-B-MM_5	Potrafi opisać przebieg reakcji chemicznej na gruncie chemii kwantowej	CH_W07	3
0310-CH-S2-B-MM_6	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe	CH_W02	3
0310-CH-S2-B-MM_7	Umie zastosować metody chemii kwantowej, zawarte w dostępnych pakietach obliczeniowych, do badania struktury, reaktywności, oddziaływań międzycząsteczkowych i właściwości spektroskopowych związków chemicznych	CH_U02 CH_U07 CH_U08	3 3 5
0310-CH-S2-B-MM_8	Umie wyznaczyć energię, entropię oraz potencjały termodynamiczne na poziomie molekularnym	CH_U02	3

0310-CH-S2-B-MM_9	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii	CH_K09	3
		CH_K10	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 kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
0310-CH-S2-B-MM_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	0310-CH-S2-B-MM_1, 0310-CH-S2-B-MM_10, 0310-CH-S2-B-MM_2, 0310-CH-S2-B-MM_3, 0310-CH-S2-B-MM_4, 0310-CH-S2-B-MM_5, 0310-CH-S2-B-MM_6
0310-CH-S2-B-MM_w_2	kolokwium pisemne	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej	0310-CH-S2-B-MM_1, 0310-CH-S2-B-MM_2, 0310-CH-S2-B-MM_3, 0310-CH-S2-B-MM_4, 0310-CH-S2-B-MM_6
0310-CH-S2-B-MM_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania projektu obliczeniowego	0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8, 0310-CH-S2-B-MM_9
0310-CH-S2-B-MM_w_4	ocenie ciągle	Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium	0310-CH-S2-B-MM_7, 0310-CH-S2-B-MM_8, 0310-CH-S2-B-MM_9

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
0310-CH-S2-B-MM_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	15	0310-CH-S2-B-MM_w_1
0310-CH-S2-B-MM_fs_2	laboratorium	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne	40	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez	45	0310-CH-S2-B-MM_w_2, 0310-CH-



				prowadzącego. Wykonanie obliczeń kwantowochemicznych .		S2-B-MM_w_3, 0310- CH-S2-B-MM_w_4
--	--	--	--	---	--	--------------------------------------