

1.	Nazwa kierunku	chemia
2.	Cykl rozpoczęcia	2017/2018 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Chemia teoretyczna

Kod modułu: 0310-CH-S2-023

1. Liczba punktów ECTS: 7

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
0310-CH-S2-023_1	Zna podstawowe klasy metod obliczeniowych: DFT (związane z pojęciem gęstości elektronowej) i WFT (związane z pojęciem funkcji falowej, z dalszym podziałem metody ab initio i półempiryczne).	CH_W02	3
0310-CH-S2-023_10	Umie zastosować metody kwantowochemiczne do badania struktury i energetyki molekularnej.	CH_U08	5
0310-CH-S2-023_11	Umie zastosować metody kwantowochemiczne do interpretacji widm w wybranych gałęziach spektroskopii molekularnej.	CH_U06	3
0310-CH-S2-023_12	Umie wybrać i dostosować bazy funkcyjne do realizowanych obliczeń.	CH_U02	3
0310-CH-S2-023_13	Umie scharakteryzować konfiguracje i stany elektronowe pod kątem symetrii spinowej.	CH_U02 CH_U07	2 3
0310-CH-S2-023_14	Umie zastosować metody obliczeniowe chemii kwantowej do opisu oddziaływań międzycząsteczkowych.	CH_U02	3
0310-CH-S2-023_15	Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii.	CH_K09 CH_K10	2 2
0310-CH-S2-023_2	Rozumie rolę przybliżenia jednoelektronowego w metodach kwantowochemicznych. Zna metodę Hartree-Focka.	CH_W09	4
0310-CH-S2-023_3	Zna pojęcie korelacji elektronowej i potrafi wskazać metody obliczeniowe uwzględniające efekty korelacyjne.	CH_W09	3
0310-CH-S2-023_4	Zna metodę DFT w ujęciu Kohna-Shama.	CH_W09	4

0310-CH-S2-023_5	Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek.	CH_W04	4
0310-CH-S2-023_6	Zna pojęcie funkcji rozdziału i podstawowe pojęcia termodynamiki statystycznej.	CH_W07	2
0310-CH-S2-023_7	Zna obowiązujące teorie wyjaśniające naturę oddziaływań międzycząsteczkowych.	CH_W07	3
0310-CH-S2-023_8	Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe.	CH_W02	2
0310-CH-S2-023_9	Umie zastosować wybrane programy dostępne w pakietach komercyjnych do obliczeń w zakresie chemii kwantowej.	CH_U08	3

3. Opis modułu

Opis	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.
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-S2-023_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-S2-023_1, 0310-CH-S2-023_10, 0310-CH-S2-023_11, 0310-CH-S2-023_12, 0310-CH-S2-023_15, 0310-CH-S2-023_2, 0310-CH-S2-023_3, 0310-CH-S2-023_4, 0310-CH-S2-023_5, 0310-CH-S2-023_6, 0310-CH-S2-023_7, 0310-CH-S2-023_8
0310-CH-S2-023_w_2	kolokwium	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej.	0310-CH-S2-023_5, 0310-CH-S2-023_6, 0310-CH-S2-023_8
0310-CH-S2-023_w_3	sprawozdanie	Ocena poprawności wykonania obliczeń i interpretacji wyników.	0310-CH-S2-023_10, 0310-CH-S2-023_13, 0310-CH-S2-023_14, 0310-CH-S2-023_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-S2-023_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	0310-CH-S2-023_w_1
0310-CH-S2-023_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.	80	0310-CH-S2-023_w_2, 0310-CH-S2-023_w_3