

|    |                                |                         |
|----|--------------------------------|-------------------------|
| 1. | <b>Field of study</b>          | <b>Chemistry</b>        |
| 2. | Academic year of entry         | 2018/2019 (summer term) |
| 3. | Level of qualifications/degree | second-cycle studies    |
| 4. | Degree profile                 | general academic        |
| 5. | Mode of study                  | full-time               |

**Module:** Quantum chemistry

**Module code:** 0310-CH-S2-B-CK

**1. Number of the ECTS credits:** 5

| 2. Learning outcomes of the module |   |                                    |                                 |
|------------------------------------|---|------------------------------------|---------------------------------|
| code                               | description   | learning outcomes of the programme | level of competence (scale 1-5) |
| 0310-CH-S2-B-CK_1                  | Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej i wyjaśnia strukturę elektronową atomów i cząsteczek.  | CH_W02                             | 3                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_10                 | Postępuje zgodnie z zasadami etyki pracy z wykorzystaniem zasobów internetowych.  | CH_K06<br>CH_K08                   | 4<br>5                          |
| 0310-CH-S2-B-CK_2                  | Zna podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w tym metod funkcji falowej, metody DFT i mechaniki molekularnej.   | CH_W09                             | 5                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_3                  | Zna elementy teorii grup w zakresie umożliwiającym opis i klasyfikację stanów kwantowych cząsteczek.  | CH_W04                             | 4                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_4                  | Zna pojęcie funkcji rozdziału i podstawowe pojęcia termodynamiki.   | CH_W07                             | 3                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_5                  | Potrafi opisać przebieg reakcji chemicznej na gruncie chemii kwantowej.   | CH_W07                             | 3                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_6                  | Potrafi scharakteryzować i sklasyfikować oddziaływania międzycząsteczkowe.  | CH_W02                             | 3                               |
| 0310-CH-S2-B-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<br>CH_U07<br>CH_U08         | 3<br>3<br>5                     |
| 0310-CH-S2-B-CK_8                  | Umie wyznaczyć energię, entropię oraz potencjały termodynamiczne na poziomie molekularnym.  | CH_U02                             | 3                               |

|                   |  |        |   |
|-------------------|--|--------|---|
| 0310-CH-S2-B-CK_9 | Ma świadomość komplementarności badań teoretycznych i doświadczalnych i ich roli w poznawaniu struktury materii. | CH_K09 | 3 |
|                   |  | CH_K10 | 3 |

| 3. Module description |   |
|-----------------------|---|
| <b>Description</b>    | 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. |
| <b>Prerequisites</b>  | Znajomość pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego.  |

| 4. Assessment of the learning outcomes of the module |               |  |  |
|--|---------------|--|--|
| code   | type          | description  | learning outcomes of the module  |
| 0310-CH-S2-B-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. | 0310-CH-S2-B-CK_1, 0310-CH-S2-B-CK_10, 0310-CH-S2-B-CK_2, 0310-CH-S2-B-CK_3, 0310-CH-S2-B-CK_4, 0310-CH-S2-B-CK_5, 0310-CH-S2-B-CK_6 |
| 0310-CH-S2-B-CK_w_2                                  | kolokwium     | Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii teoretycznej.  | 0310-CH-S2-B-CK_1, 0310-CH-S2-B-CK_2, 0310-CH-S2-B-CK_3, 0310-CH-S2-B-CK_4, 0310-CH-S2-B-CK_6  |
| 0310-CH-S2-B-CK_w_3                                  | sprawozdanie  | Ocena poprawności wykonania projektu obliczeniowego.   | 0310-CH-S2-B-CK_7, 0310-CH-S2-B-CK_8, 0310-CH-S2-B-CK_9  |
| 0310-CH-S2-B-CK_w_4                                  | ocenie ciągle | Ocena praktycznych umiejętności pracy w laboratorium.  | 0310-CH-S2-B-CK_7, 0310-CH-S2-B-CK_8, 0310-CH-S2-B-CK_9  |

| 5. Forms of teaching |                    |  |                 |  |                 |   |
|----------------------|--------------------|--|-----------------|--|-----------------|---|
| code                 | form of teaching   |  |                 | required hours of student's own work   |                 | assessment of the learning outcomes of the module |
|                      | type               | description (including teaching methods)   | number of hours | description  | number of hours |   |
| 0310-CH-S2-B-CK_fs_1 | lecture            | 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-CK_w_1                               |
| 0310-CH-S2-B-CK_fs_2 | laboratory classes | Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne.                     | 40              | Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie.   | 45              | 0310-CH-S2-B-CK_w_2, 0310-CH-                     |

|  |  |  |  |   |  |                                  |
|--|--|--|--|---|--|----------------------------------|
|  |  |  |  | Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie obliczeń kwantowochemicznych . |  | S2-B-CK_w_3, 0310-CH-S2-B-CK_w_4 |
|--|--|--|--|---|--|----------------------------------|