

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

Module: Theoretical chemistry

Module code: 0310-CH-S2-023

1. Number of the ECTS credits: 7

| 2. Learning outcomes of the module | | | |
|------------------------------------|---|------------------------------------|---------------------------------|
| code | description | learning outcomes of the programme | level of competence (scale 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. Module description | |
|-----------------------|---|
| Description | 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. |
| Prerequisites | 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-S2-023_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. 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-S2-023_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. | 20 | 0310-CH-S2-023_w_1 |
| 0310-CH-S2-023_fs_2 | laboratory classes | 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 |