

**Karta przedmiotu**

|                                          |                                                                                                                                                        |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
|------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|-----------------------------|----------------------------|------------------|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu                   | Komputer zamiast próbówki (Ćw. laboratoryjne), PG_00080800                                                                                             |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
| Kierunek studiów                         | Biznes chemiczny (O)                                                                                                                                   |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
| Data rozpoczęcia studiów                 | październik 2024 r.                                                                                                                                    | Rok akademicki realizacji przedmiotu                      |                             |                            | 2026/2027        |                       |       |
| Poziom kształcenia                       | I stopnia - inżynierskie                                                                                                                               | Grupa zajęć                                               |                             | Grupa zajęć fakultatywnych |                  |                       |       |
| Forma studiów                            | stacjonarne                                                                                                                                            | Sposób realizacji                                         |                             |                            | na uczelni       |                       |       |
| Rok studiów                              | 3                                                                                                                                                      | Język wykładowy                                           |                             |                            | polski<br>Polski |                       |       |
| Semestr studiów                          | 5                                                                                                                                                      | Liczba punktów ECTS                                       |                             |                            | 2.0              |                       |       |
| Profil kształcenia                       | ogólnoakademicki                                                                                                                                       | Forma zaliczenia                                          |                             |                            | zaliczenie       |                       |       |
| Jednostka prowadząca                     | Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej                                                                                                |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
| Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców) | Odpowiedzialny za przedmiot                                                                                                                            |                                                           | prof. dr hab. Piotr Skurski |                            |                  |                       |       |
|                                          | Prowadzący zajęcia z przedmiotu                                                                                                                        |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
| Formy zajęć                              | Forma zajęć                                                                                                                                            | Wykład                                                    | Ćwiczenia                   | Laboratorium               | Projekt          | Seminarium            | RAZEM |
|                                          | Liczba godzin zajęć                                                                                                                                    | 0.0                                                       | 0.0                         | 30.0                       | 0.0              | 0.0                   | 30    |
|                                          | W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0                                                                                                            |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |
| Aktywność studenta i liczba godzin pracy | Aktywność studenta                                                                                                                                     | Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów |                             | Udział w konsultacjach     |                  | Praca własna studenta | RAZEM |
|                                          | Liczba godzin pracy studenta                                                                                                                           | 30                                                        |                             | 5.0                        |                  | 15.0                  | 50    |
| Cel przedmiotu                           | Zaznajomienie studentów z możliwościami rozwiązywania konkretnych zagadnień chemicznych przy użyciu komputera i współczesnych programów obliczeniowych |                                                           |                             |                            |                  |                       |       |

|                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                             |                                                                                 |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Efekty uczenia się przedmiotu                                                                                                                          | Efekt kierunkowy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Efekt z przedmiotu                                                                                                          | Sposób weryfikacji i oceny efektu                                               |
|                                                                                                                                                        | [BCHINŻ_U04] W toku realizacji zadań inżynierskich stosuje metody statystyczne, techniki informatyczne oraz wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do opisu procesów chemicznych i danych eksperymentalnych.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia stosując metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej | [SU5] realizacja zadania problemowego                                           |
|                                                                                                                                                        | [BCHINŻ_W03] Opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Student rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej.                                             | [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja<br>[SW5] realizacja zadania problemowego |
|                                                                                                                                                        | [BCHINŻ_W04] Opisuje rolę eksperymentu i symulacji komputerowych w procesie projektowania zagadnień inżynierskich.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Student wskazuje i wybiera właściwe algorytmy i programy umożliwiające wykonanie obliczeń i rozwiązanie problemu.           | [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja<br>[SW5] realizacja zadania problemowego |
|                                                                                                                                                        | [BCHINŻ_U09] Wykorzystując nabytą wiedzę, umiejętności oraz różnorodne źródła informacji naukowej samodzielnie przygotowuje prace pisemne oraz wystąpienia ustne.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Student dokonuje samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę                                               | [SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja<br>[SU5] realizacja zadania problemowego |
| [BCHINŻ_K02] Pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i samodzielność w działaniach oraz efektywnie współdziała w zespole, pełniąc w nim różne role. | Student pracuje w zespole; jest koleżeński, szanuje zwierzchnika i kolegów.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | [SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja                                                                                      |                                                                                 |
| Treści przedmiotu                                                                                                                                      | <p>Przygotowanie danych wejściowych do obliczeń chemicznych oraz liczbowa i graficzna interpretacja wyników, określanie przestrzennej struktury molekuli, uzyskiwanie spektralnych charakterystyk molekuli (symulacja widm IR, NMR, UV), wyznaczanie charakterystyk fizykochemicznych (entalpia, entalpia swobodna, entropia, ciepło właściwe, moment dipolowy i kwadrupolowy, polaryzowalność i hiperpolaryzowalność), modelowanie reakcji chemicznych (badanie mechanizmu, wyznaczanie barier aktywacyjnych, określanie szybkości reakcji). Umiejętności jakie powinien osiągnąć Doktorant po wysłuchaniu oferowanego wykładu: Wiedza ogólna zakresu zagadnień chemicznych możliwych do rozwiązania na drodze teoretycznej, wiadomości umożliwiające teoretyczne przewidywanie struktury oraz fizykochemicznych właściwości dowolnych molekuli, umiejętność doboru metody teoretycznej do badania konkretnego zagadnienia chemicznego, wiedza o doborze programu obliczeniowego oraz podstawach obsługi tego typu programów, umiejętność poprawnej interpretacji wyników uzyskiwanych przy użyciu metod obliczeniowych. Umiejętności jakie powinien osiągnąć Doktorant po wykonaniu oferowanych ćwiczeń: wiedza dotycząca przygotowania danych do pakietów obliczeniowych, umiejętność samodzielnego wykonania obliczeń mających na celu określenie struktury dowolnej molekuli, symulacji widm IR, NMR i UV, wyznaczenie momentu dipolowego i kwadrupolowego, polaryzowalności, hiperpolaryzowalności, wartości funkcji termodynamicznych, umiejętność samodzielnego modelowania mechanizmu reakcji chemicznej na drodze wyznaczania struktury stanów przejściowych i produktów pośrednich, określania barier kinetycznych i termodynamicznych oraz obliczania stałej szybkości procesu.</p> |                                                                                                                             |                                                                                 |
| Wymagania wstępne i dodatkowe                                                                                                                          | Umiejętność obsługi komputera PC na poziomie podstawowym.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                             |                                                                                 |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się                                                                                          | Sposób oceniania (składowe)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Próg zaliczeniowy                                                                                                           | Składowa ocena końcowej                                                         |
|                                                                                                                                                        | Aktywność podczas zajęć                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 51.0%                                                                                                                       | 25.0%                                                                           |
|                                                                                                                                                        | Sprawozdania z wykonanych zadań                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 51.0%                                                                                                                       | 75.0%                                                                           |
| Zalecana lista lektur                                                                                                                                  | Podstawowa lista lektur                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Molekularna mechanika kwantowa (P. Atkins, R. Friedman)                                                                     |                                                                                 |
|                                                                                                                                                        | Uzupełniająca lista lektur                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Idee chemii kwantowej (L. Piela)                                                                                            |                                                                                 |
|                                                                                                                                                        | Adresy eZasobów                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                             |                                                                                 |
| Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania                                                                                      | Zaproponować ścieżkę postępowania zmierzającego do wyznaczenia potencjału jonizacji i powinowactwa elektronowego dla danej cząsteczki (przy użyciu dowolnej metody obliczeniowej chemii kwantowej).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                             |                                                                                 |
| Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu                                                                                                                  | Nie dotyczy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                             |                                                                                 |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.