

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemical bonding via quantum chemistry tools (Ćw. audytoryjne), PG_00129572						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	2		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	4		Liczba punktów ECTS		2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca							
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Iwona Anusiewicz				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	30.0	0.0	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	Celem kursu jest nabycie wiedzy i umiejętności, jak zidentyfikować za pomocą obliczeń chemii kwantowej różne rodzaje wiązań i oddziaływań chemicznych.Nauka zastosowania metod obliczeniowych do analizy wiązań chemicznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student wie, jaką metodę teoretyczną wybrać do badania właściwości fizycznych danej cząsteczki.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student nabywa umiejętność oszacowywania stabilności różnych układów molekularnych, rozwija umiejętność wyboru właściwej metody chemii kwantowej do badania różnego typu wiązania chemicznego,	[SU2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.	Student definiuje typy wiązań i oddziaływań chemicznych	[SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student wie jak określić stabilność układów molekularnych poprzez charakterystykę najważniejszych oddziaływań odpowiedzialnych za wiązanie.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student posiada umiejętność wizualizacji i interpretacji wyników przeprowadzonych obliczeń teoretycznych.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student wie jak dobrać odpowiednie metody teoretyczne i jak przeprowadzić badanie danej cząsteczki chemicznej.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport
[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania. Uczy się zasad bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy. Rozwija umiejętność pracy w zespole.	[SK2] prezentacja/projekt/referat/ raport	
Treści przedmiotu	Różne rodzaje wiązań chemicznych: wiązania kowalencyjne, wiązania jonowe, siły międzycząsteczkowe; teoretyczne metody stosowane do identyfikacji wiązań chemicznych w strukturze molekularnej; wyznaczenie właściwości fizycznych (długości wiązań, energia wiązań, rozkład ładunku, polaryzowalność, momenty dipolowe) związanych z różnymi rodzajami wiązań chemicznych/oddziaływań molekularnych; orbitale molekularne wizualizacja i interpretacja; obliczanie i analiza orbitali NBO; wizualizacja orbitali NBO. Obliczenia i analiza rzędów wiązań Wiberga.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	podstawowa wiedza z zakresu chemii		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Kryteria oceny zgodne z Regulaminem Studiów Uniwersytetu Gdańskiego. Głównym kryterium oceny sprawozdań są prawidłowe odpowiedzi na pytania zawarte w instrukcji ćwiczeń.	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Atkins Molecules, P. Atkins, Cambridge University Press, 2003	
	Uzupełniająca lista lektur	Handbook of Computational Chemistry, ed. J. Leszczyński, Springer, Science+Business Media B.V. 2012	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Opisz za pomocą metody MP2 i bazy aug-cc-pVDZ strukturę elektronową cząsteczki NaCl i jej anionu.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		