

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputer zamiast próbówki (Ćw. laboratoryjne), PG_00080800						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2028/2029		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	3		Język wykładowy		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 [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 [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 [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	Przygotowanie danych wejściowych do obliczeń chemicznych oraz liczbową i graficzną inter-pretacja wyników, określanieprzestrzennej struktury molekuł, uzyskiwanie spektralnych charakterystyk molekuł (sy-mulacja 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 osiąść Doktorant po wysłuchaniu oferowanego wykładu: Wiedza ogólna zakresu zagadnień chemicznych możliwych do rozwiązania na drodze teoretycznej, wiadomości umożliwiające teoretyczne przewidywanie struk-tury oraz fizykochemicznych właściwości dowolnych molekuł, umiejętność doboru metody teoretycznej do badania konkret-nego 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 osiąść 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, hiperpola-ryzowalności, wartości funkcji termodynamicznych, umiejętność samodzielnego modelowania mechanizmu reakcji chemicz-nej na drodze wyznaczania struktury stanów przejściowych i produktówpośrednich, określania barier kinetycznych i termody-namicznych oraz obliczania stałej szybkości procesu.		
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 oceny 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.