

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: **Chemia obliczeniowa (WTCAXCSM-ChO)**

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: **Computational chemistry**

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Cykl dydaktyczny: Semestr zimowy 2026/2027
Koordynator przedmiotu cyklu: dr inż. Krzysztof Jasek

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Strona WWW:

<http://www.wtc.wat.edu.pl>

Skrócony opis:

Wprowadzenie do chemii obliczeniowej. Metody obliczeniowe bazujące na mechanice molekularnej i kwantowej. Elementy dynamiki molekularnej. Wykorzystanie wybranego oprogramowania do obliczania geometrii i energii cząsteczek, równowag i kinetyki reakcji chemicznych. Obliczanie wielkości spektroskopowych cząsteczek.

Opis:

1. Wprowadzenie do obliczeń molekularnych: metody oparte o mechanikę molekularną i mechanikę kwantową. 4 godz.
2. Oprogramowanie wykorzystywane do obliczeń molekularnych. 2 godz.
3. Wyznaczanie minimum energii potencjalnej cząsteczek – aspekty obliczeniowe. 2 godz.
4. Wyznaczanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek. 4 godz.
5. Modelowanie konformerów z wykorzystaniem dynamiki molekularnej. Uśrednianie Boltzmana 2 godz.
6. Modelowanie reakcji chemicznych:
– identyfikowanie substratów, produktów i stanów przejściowych oraz wyznaczanie ich energii, 4 godz.
– procedury wyznaczania ścieżek reakcji. 2 godz.
7. Modelowanie obecności rozpuszczalnika. 2 godz.
8. Obliczanie funkcji termodynamicznych i ich wykorzystanie do wyznaczania stałych równowag i stałych szybkości reakcji. 4 godz.
9. Obliczenia spektroskopowe NMR, IR i UV-Vis. 2 godz.
10. Modelowanie kryształów i innych struktur regularnych. 2 godz.

Literatura:

1. David O. Hayward, Mechanika kwantowa dla chemików, PWN, Warszawa 2007
2. Anna Kaczmarek-Kędziera, Marta Ziegler-Borowska, Dariusz Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wydawnictwo Naukowe UMC, Toruń 2014
- 3 James Foresman, Aleen Frisch, Exploring chemistry with electronic structure methods, Third ed., Gaussian Inc. 2005

Efekty uczenia się:

- W1 - Zna współczesne poglądy na budowę i właściwości związków chemicznych - K_W02.
W2 - Zna wybrane programy komputerowe do modelowania molekularnego cząsteczek i ich układów oraz rozumie podstawy metod obliczeniowych w nich wykorzystywanych - K_W05
W3 - Zna i rozumie podstawowe pojęcia i zasady z zakresu ochrony prawa autorskiego oraz konieczność zarządzania zasobami własności intelektualnej - K_W14
U1 - Potrafi wykorzystać wiedzę informatyczną i chemiczną do stosowania profesjonalnego oprogramowania w analizie wyników i prowadzeniu symulacji związanych z problemami chemicznymi - K_U06.
U2 - Potrafi korzystać z komercyjnych pakietów chemicznych oraz baz informacji naukowej - K_U06
U3 - Potrafi w sposób krytyczny ocenić i interpretować wyniki eksperymentów i obliczeń teoretycznych, a także ocenić dokładność uzyskanych wyników - K_U07.
U4 - Posiada pogłębioną umiejętność przygotowania prac pisemnych i ustnych z zakresu obliczeń chemicznych z wykorzystaniem opracowań polsko- i obcojęzycznych, a także własnych obserwacji i przemysłów - K_U08.
U5 - Potrafi współdziałać z innymi osobami w ramach prac zespołowych i podejmować wiodącą rolę w zespołach - K_U13.

Metody i kryteria oceniania:

Przedmiot zaliczany jest na podstawie egzaminu.
Egzamin jest przeprowadzany w formie pisemnej.
Warunkiem dopuszczenia do egzaminu jest zaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych.
Warunkiem koniecznym uzyskania oceny pozytywnej z przedmiotu jest wykazanie się wiedzą oraz umiejętnościami wymienionymi w efektach kształcenia, które sprawdzane są na laboratoriach (na podstawie bieżącej pracy studenta i sprawozdań) oraz egzaminie.
Ocenę bardzo dobrą otrzymuje student, który posiadał wiedzę, umiejętności i kompetencje przewidziane efektami uczenia w stopniu bardzo dobrym, a ponadto wykazuje zainteresowanie przedmiotem, w sposób twórczy podchodzi do powierzonych zadań i wykazuje się samodzielnością w zdobywaniu wiedzy. Wykazuje się wytrwałością i samodzielnością w pokonywaniu trudności oraz systematycznością pracy.
Ocenę dobrą otrzymuje student, który posiadał wiedzę i umiejętności przewidziane efektami uczenia w stopniu dobrym. Potrafi rozwiązywać zadania i problemy o średnim stopniu trudności.
Ocenę dostateczną otrzymuje student, który posiadał wiedzę i umiejętności przewidziane efektami uczenia w stopniu dostatecznym. Samodzielnie rozwiązuje zadania i problemy o niskim stopniu trudności. W jego wiedzy i umiejętnościach zauważalne są luki, które potrafi jednak uzupełnić pod kierunkiem nauczyciela.
Ocenę niedostateczną otrzymuje student, który nie posiadał wiedzy, umiejętności i kompetencji w zakresie koniecznych wymagań. Na końcową ocenę z ćwiczeń laboratoryjnych składają się oceny ze sprawozdań oraz aktywność studenta w trakcie zajęć.
Na końcową ocenę z przedmiotu składa się ocena z egzaminu z uwzględnieniem oceny z ćwiczeń laboratoryjnych oraz zaangażowanie i sposób podejścia studenta do nauki.

Praktyki zawodowe:

brak

Forma studiów
stacjonarne
Rodzaj studiów
II stopnia
Rodzaj przedmiotu
obowiązkowy
Przedmioty wprowadzające
Chemia teoretyczna Chemia ogólna i nieorganiczna Chemia organiczna
Programy
semestr II kierunek Chemia i analiza materiałów niebezpiecznych specjalności: 1. Materiały wysokoenergetyczne 2. Materiały specjalnego przeznaczenia
Forma zajęć liczba godzin/rygor
wykłady 8 godz. - egzamin ćwiczenia 22 godz. - zaliczenie na ocenę razem 30 godz.
Autor
dr inż. Krzysztof Jasek
Bilans ECTS
Aktywność / obciążenie studenta w godz. 1. Udział w wykładach / 8 2. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów / 10 3. Udział w laboratoriach / 22 4. Samodzielne przygotowanie się do laboratoriów / 10 5. Przygotowanie do egzaminu / 8 6. Udział w egzaminie / 2 Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 60 / 2 ECTS Zajęcia z udziałem nauczycieli: 30 / 1,2 ECTS Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 60 / 2 ECTS
Dane dotyczące przedmiotu cyklu:
Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:
Egzamin