

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	CHEMIA TEORETYCZNA I MODELOWANIE W CHEMII, PG_00064390						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	2		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	4		Liczba punktów ECTS		4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Nieorganicznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr inż. Andrzej Okuniewski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr inż. Andrzej Okuniewski				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adresy kursu na platformie eNauczanie: Moodle ID: 3127 Chemia teoretyczna i modelowanie w chemii 2025/26 https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=3127						
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	60		10.0		30.0	100
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z podstawami mechaniki kwantowej, chemii teoretycznej i metodami modelowania molekularnego oraz rozwinięcie umiejętności wykorzystania narzędzi obliczeniowych do analizy struktury i właściwości układów chemicznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K6_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się i innych osób, rozumie wagę działań grupowych i zespołowych	Student pracuje samodzielnie i w zespole podczas realizacji zadań modelowania molekularnego, wykazuje odpowiedzialność za wyniki obliczeń i świadomość potrzeby aktualizacji wiedzy w zakresie metod obliczeniowych.	[SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
	[K6_U08] stosuje komputerowe wspomaganie, typowe metody, aparaturę chemiczną i narzędzia niezbędne do rozwiązania prostych zadań inżynierskich, obejmujących m.in. procesy technologiczne, z przeprowadzeniem wstępnej analizy ekonomicznej podejmowanych działań inżynierskich	Student stosuje narzędzia modelowania molekularnego i chemii kwantowej do optymalizacji geometrii cząsteczek, obliczania energii oraz symulacji procesów chemicznych, interpretuje wyniki obliczeń i ocenia ograniczenia stosowanych metod.	[SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K6_U01] pozyskuje informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, dokonując ich interpretacji, krytycznej oceny, podsumowania, formułowania i uzasadniania opinii, samodzielnie analizuje i wykonuje rysunki techniczne z zastosowaniem wspomaganie komputerowego	Student pozyskuje dane strukturalne z baz chemicznych i literatury, wykorzystuje różne formaty plików strukturalnych, interpretuje wyniki obliczeń oraz przedstawia je w formie graficznej i opisowej.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K6_W03] wykazuje się wiedzą w obszarze chemii teoretycznej i dyscyplin inżynierskich z nią powiązanych, niezbędną do przewidywania struktur, projektowania i prowadzenia podstawowych operacji procesów technologicznych za pomocą narzędzi mechaniki molekularnej	Student posiada wiedzę niezbędną do wyjaśnienia podstawy mechaniki kwantowej, modelowania molekularnego, mechaniki i dynamiki molekularnej. Zna znaczenie hiperpowierzchni energii potencjalnej oraz umie opisać zależność pomiędzy strukturą i energią układu.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład Historia chemii strukturalnej. Badania strukturalne. Bazy danych i formaty plików strukturalnych. Idea modelowania molekularnego, pola siłowe. Mechanika i dynamika molekularna. Symulacje Monte Carlo. Analiza konformacyjna. Symulacje układów biologicznych. Oprogramowanie i sprzęt do modelowania. Grafika molekularna. Historia mechaniki kwantowej. Dualizm korpuskularno-falowy. Postulaty mechaniki kwantowej, nieoznaczoność. Funkcje wielu zmiennych, równania różniczkowe. Cząstka w jednowymiarowej studni potencjału. Zjawisko tunelowe. Oscylator harmoniczny. Cząstka na okręgu. Cząstka w dwuwymiarowej studni potencjału. Rotator sztywny. Atom wodoru i jony wodoropodobne. Układy wieloelektronowe. Treści przedmiotu - laboratoria Wprowadzenie do pakietu HyperChem. Mechanika i dynamika molekularna. Optymalizacja geometrii i badanie struktury elektronowej cząsteczek. Wyznaczanie produktów pośrednich / stanów przejściowych reakcji. Badanie mechanizmu wybranej reakcji (praca w zespole).		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student powinien posiadać wiedzę z zakresu chemii ogólnej, fizyki i matematyki (rachunek różniczkowy i całkowy) oraz podstawową umiejętność obsługi komputera.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Wykład	60.0%	50.0%
	Laboratorium	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	D. O. Hayward: Mechanika kwantowa dla chemików. <i>Wydawnictwo Naukowe PWN</i>, Warszawa 2007. A. R. Leach: Molecular Modelling: Principles and Applications. <i>Pearson</i>, 2001.	
	Uzupełniająca lista lektur	R. F. Nalewajski: Podstawy i metody chemii kwantowej. Wykłady. <i>Wydawnictwo Naukowe PWN</i>, Warszawa 2001. L. Piel: Idee chemii kwantowej. <i>Wydawnictwo PWN</i>, Warszawa 2006. P. W. Atkins: Molekularna mechanika kwantowa: wstęp do chemii kwantowej. <i>Wydawnictwo PWN</i>, Warszawa 1974. H. Buchowski: Elementy termodynamiki statystycznej. <i>Wydawnictwa Naukowo-Techniczne</i>, Warszawa 1998.	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Przykładowe zagadnienia znajdują się na platformie eNauczanie.
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.