



**POLITECHNIKA
BYDGOSKA**

Wydział Technologii
i Inżynierii Chemicznej

Karta przedmiotu
Obliczenia chemiczne w chemii organicznej

1. Informacje podstawowe

Kierunek studiów technologia chemiczna Specjalność: technologia procesów chemicznych Jednostka zarządzająca kierunkiem studiów Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej Poziom studiów drugiego stopnia (mgr inż.) Profil studiów Profil ogólnoakademicki Forma studiów studia niestacjonarne		Cykl kształcenia (nabór) 2024/25 Kod przedmiotu 02TCTPCN.DI4E.2839.24 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Obowiązkowy fakultatywny Blok zajęciowy Przedmioty/bloki obieralne	
Wymagania wstępne		Brak wymagań wstępnych.	
Przedmioty wprowadzające		Brak przedmiotów wprowadzających.	
Koordynator		Janina Kabatc-Borcz	
Okres Semestr 3		Forma zaliczenia Zaliczenie na ocenę Forma prowadzenia i godziny zajęć Wykład: 18	Liczba punktów ECTS 2.0

2. Efekty uczenia się dla przedmiotu

Kod	Opis efektów uczenia się	Odniesienie do kierunkowych efektów uczenia się	Odniesienie do charakterystyk PRK
Wiedza:			
W1	Ma specjalistyczną wiedzę zakresu tematyki przedmiotów proponowanych do wyboru.	TC_O2_K_W01	P7S_WG_inż P7S_WG
Umiejętności:			
U1	Potrafi wykorzystać specjalistyczną wiedzę z zakresu tematyki przedmiotów proponowanych do wyboru.	TC_O2_K_U14	P7S_UW_inż P7S_UW
Kompetencje społeczne:			
K1	Potrafi współdziałać i pracować indywidualnie i w grupie, przyjmując w niej różne role.	TC_O2_K_K06	P7S_KO

3. Treści programowe

Lp.	Treści programowe	Formy zajęć	Efekty uczenia się dla przedmiotu
1.	Wykłady dotyczą metod stosowanych w chemii obliczeniowej, a zawierają informacje tak teoretyczne (opisujące problemy jakie można podejmować za pomocą technik obliczeniowych) jak i bardziej praktyczne (jakimi metodami obliczeniowymi można podjęte problemy rozwiązywać). Omówienie metod obliczeniowych dla takich właściwości chemicznych cząsteczek jak: przesunięcia chemiczne jąder wodoru, węgla i azotu, energia względna tautomerów, energia oddziaływań międzycząsteczkowych, energia izomeryzacji, przewidywanie wybranych właściwości związków chemicznych.	Wykład	W1, U1, K1

4. Metody prowadzenia zajęć, weryfikacji efektów uczenia się i warunki zaliczenia

Forma zajęć			
Wykład	Metody prowadzenia zajęć:		
	Wykład		
	Metody (sposoby) weryfikacji:		Udział:
	Zaliczenie pisemne		100%
	Warunki zaliczenia przedmiotu:		
	Pisemne zaliczenie z pytaniami otwartymi. O ocenie pozytywnej decyduje ilość uzyskanych punktów (>50% maksymalnej liczby punktów): dst 51-60%, dst plus 61-70%, db 71-80%, db plus 81-90%, bdb > 90%. Warunkiem zaliczenia przedmiotu jest osiągnięcie wszystkich założonych efektów uczenia się.		
Efekt uczenia się dla przedmiotu	Metody (sposoby) weryfikacji		
	Zaliczenie pisemne		

W1	x
U1	x
K1	x

5. Literatura

Literatura podstawowa

1. Pielak L., 2012 r., Idee Chemii Kwantowej, Wydawnictwo Naukowe PWN.
2. Young D., 2001 r., Computational Chemistry.
3. Podstawowa literatura z zakresu chemii organicznej: Chemia Organiczna, Boyd, Morrison; Chemia Organiczna, Mc Murry.

Literatura uzupełniająca

1. Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, Foresman, Frisch.
2. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, Young.
3. Dokumentacja elektroniczna dla programów Gaussian i GAMESS. Strona: www.gaussian.com

6. Nakład pracy studenta - bilans godzin i punktów ECTS

Aktywność studenta		Obciążenie studenta Liczba godzin
Zajęcia prowadzone z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego lub innych osób prowadzących zajęcia	Wykład	18
Praca własna studenta	Konsultacje	2
	Przygotowanie do zajęć	10
	Studiowanie literatury	15
	Inne (przygotowanie do egzaminu)	8
Łączny nakład pracy studenta		53
Liczba punktów ECTS		2

* Godzina (dydaktyczna) oznacza 45 minut