

### Blok laboratorium

Wykładowca: **prof. dr hab. Stanisław Kucharski\***

*\* zespół dydaktyczny pod kierunkiem prof. dra hab. Stanisława Kucharskiego*

---

### Treści merytoryczne:

Blok laboratorium stanowi uzupełnienie zestawu przedmiotów specjalizacyjnych. Studenci mają do dyspozycji opracowane moduły ćwiczeniowe dotyczące następujących tematów: Programowanie obliczeń naukowych w języku Python, Bazy funkcyjne i pakiety obliczeniowe chemii kwantowej, Algorytmy rachunku macierzowego, Chemometria w MATLABie, Komputerowe generowanie widm oscylacyjnych, Numeryczne modelowanie własności elektrycznych i magnetycznych cząsteczek i materiałów, Widma elektronowe - symulacje komputerowe, Metoda DFT w zagadnieniach chemicznych, Oddziaływanie międzymolekularne, Modelowanie QSAR. Opis każdego modułu zawiera część teoretyczną i zalecaną literaturę, przykładowy opis obliczeń dla wybranego układu, zasady przygotowania danych i interpretacji wyników oraz analizę rezultatów w różnych aspektach. Następnie student ma do wyboru kilka propozycji układów molekularnych, dla których wykonuje sam obliczenia oraz przygotowuje szczegółowy opis i interpretację wyników. Studenci wykonują wszystkie ćwiczenia włączone do Bloku laboratoryjnego.

---

### Cele przedmiotu:

Zapoznanie studentów z praktycznymi aspektami obliczeń dla małych, średnich i dużych cząsteczek oraz ze sposobem rozwiązywania problemów chemicznych i spektroskopowych na drodze teoretycznej.

---

**Efekty kształcenia:**

Student powinien posiadać umiejętności wykonywania obliczeń metodami teoretycznymi oraz prawidłowej interpretacji otrzymanych wyników.

---

**Zalecana literatura:**

1. Materiały metodyczne do ćwiczeń.