



## Academic Course Specification Form

### استمارة توصيف المقرر الأكاديمي

#### القسم الخاص بالطالب Section Concerning the Student

1. Course Code:	CHEMY457	1. رمز المقرر:
2. Course Title	Computational Chemistry	2. اسم المقرر:
3. College:	Science	3. الكلية:
4. Department:	Chemistry	4. القسم:
5. Academic Program:	Bachelor of Science in Chemistry	5. البرنامج الأكاديمي:
6. Course Credits:	3-0-3	6. عدد الساعات المعتمدة:
7. Course NQF Level:	8	7. مستوى المقرر وفقاً للإطار الوطني للمؤهلات:
8. Notional Hours:	133	8. عدد الساعات الافتراضية:
9. NQF Credits:	13	9. عدد الساعات المعتمدة للمقرر وفقاً للإطار الوطني للمؤهلات:
10. Prerequisite:	CHEMY 321 & CHEMY 331	10. المتطلب السابق للمقرر:
11. Lectures Timing & Location:		11. وقت المحاضرة ومكانها:
12. General Mode of Teaching and Learning	تقليدي Traditional	12. النمط العام للتعليم والتعلم:

1

University of Bahrain – Quality Assurance & Accreditation Center - Academic Course Specification Form  
May 2024

Changing any elements of the form is strictly prohibited.  
يرجى عدم تغيير أي عنصر من عناصر الاستمارة

13. Course Coordinator:		13. منسق المقرر:
14. Course Instructor:		14. مدرّس المقرر:
15. Office Hours and Location:		15. الساعات المكتبية ومكانها:
16. Instructor's Email:		16. البريد الإلكتروني لمدرّس المقرر:
17. Academic Year:		17. السنة الأكاديمية:
18. Semester:		18. الفصل الدراسي:
19. Textbook(s):		19. الكتب الدراسية للمقرر:
.		
20. References:		20. المراجع:
21. Other Learning Resources Used (e.g. e-learning, field visits, periodicals, software, etc.):		21. مصادر التعلّم الأخرى (مثال: التعلّم الإلكتروني، زيارات ميدانية، دوريات، برمجيات، إلخ....)
22. Course Description (as published in the College Catalogue):		22. توصيف المقرر (حسب ما ورد في دليل الكلية):
<p>Overview of various computational tools; applications of computational methods in different fields of chemistry, geometry optimization and conformational analysis, Spectroscopic analysis (UV, IR, Raman, NMR), Electronic parameters and properties study, reaction mechanism, Applications of computational Chemistry in material chemistry (non-linear optical properties, sensor properties, energy materials, energy storage materials etc.); interaction energy studies particularly in drug activity and drug delivery, challenges and outcomes, importance of benchmark studies for evaluation of accurate cost-effective methods, their applications in various disciplines, quantitative structure activity relationship (QASR).</p>		
23. Course Intended Learning Outcomes (3 to 5 CILOs):		23. مخرجات التعلّم للمقرر (CILOs) (3 إلى 5 مخرجات تعلّمية):
1. Explain critically the k principles for quantum chemical and molecular mechanic methods of computing the geometry and energy of molecules.		
2. Use specialist skills to apply computer-based calculations to determine the geometry, energies and electronic properties of molecules		
3. Discuss the chemistry golden rule of “structure dictates properties”.		
4. Use specialist skills to compute spectral properties and structure identification		
5. Use a range of computational tools to gain insights into chemical systems.		

24. Course Assessment Percentages (as per Regulations of Study and Examination at the University of Bahrain):		24. أساليب التقييم ونسبها المئوية (بحسب نظام الدراسة والامتحانات في جامعة البحرين):		
Assessment التقييم	Type النوع	Percentage النسبة	Assessment Date تاريخ التقييم	
Midterm I	Individual فردي	20%		
Midterm II	Individual فردي	20%		
Quizzes	individual	10%		
Assignments	Individual فردي	10%		
Final Exam	individual	40%		
<b>Total</b>	<b>100%</b>			
25. Description of Topics Covered		25. وصف الموضوعات التي ينبغي تناولها:		
Topic Title (e.g. chapter/experiment title) الموضوع		Description التفصيل		
CH1		Overview of various computational tools; applications of computational methods in different fields of chemistry		
CH2		geometry optimization and conformational analysis, Spectroscopic analysis (UV, IR, Raman, NMR)		
CH3		Electronic parameters and properties study, reaction mechanism		
CH4		Applications of computational Chemistry in material chemistry (non-linear optical properties)		
CH5		sensor properties, energy materials, energy storage materials etc.); interaction energy studies particularly in drug activity and drug delivery, challenges and outcomes,		
CH6		importance of benchmark studies for evaluation of accurate cost-effective methods, their applications in various disciplines, quantitative structure activity relationship (QASR)		
26. Weekly Schedule		26. الجدول الأسبوعي		
Week الأسبوع	Date التاريخ	Topics Covered الموضوعات المتناولة	CILOs مخرجات التعلم للمقرر (CILOs)	Teaching/Assessment Mode and Method منهجية ونمط التدريس/التقييم
1		Overview of various computational tools	1,2,3,4,5	Traditional تقليدي

2		applications of computational methods in different fields of chemistry, geometry optimization and conformational analysis	2,3	Traditional تقليدي
3		Spectroscopic analysis (UV, IR, Raman, NMR)	1,2,4	Traditional تقليدي
4		Electronic parameters and properties study, reaction mechanism	1,2	Traditional تقليدي
5		Applications of computational Chemistry in material chemistry (non-linear optical properties)	1,2,3	Traditional تقليدي
6		sensor properties, energy materials, energy storage materials	3,4	Traditional تقليدي
7		interaction energy studies particularly in drug activity and drug delivery	4,5	Traditional تقليدي
8		challenges and outcomes	1,5	Traditional تقليدي
9		importance of benchmark studies for evaluation of accurate cost-effective methods	1-5	Traditional تقليدي
10		their applications in various disciplines	2,3	Traditional تقليدي
11		quantitative structure activity relationship (QASR)	1,2	Traditional تقليدي
12		Training of software	1-5	Traditional تقليدي
13		Training of software	1-5	Traditional تقليدي
14		Training of software	1-5	Traditional تقليدي
15		Training of software	1-5	Traditional تقليدي
16				
<b>27. Academic Integrity Statement</b>			<b>27. بيان النزاهة الأكاديمية</b>	

<p>Students are to observe the highest level of honesty and academic ethics in pursuit of their academic goals as per UOB Regulations of Student Conduct and Academic Integrity, <a href="#">Anti-plagiarism Policies</a>, and <a href="#">Students' Rights and Responsibilities Handbook</a>. The consequences for cheating, plagiarism, unauthorized collaboration, and other forms of academic dishonesty can be very serious and will be dealt with as per the aforementioned policies and regulations.</p>	<p>يتعين على الطلبة الالتزام بأعلى مستويات الصدق والأمانة والأخلاق الأكاديمية في سعيهم لتحقيق أهدافهم الأكاديمية وفقاً للوائح سلوك الطلاب والنزاهة الأكاديمية، <a href="#">سياسات مكافحة الانتحال</a>، <a href="#">ودليل حقوق الطلبة واجباتهم</a>، المعمول بها في جامعة البحرين. يمكن لعواقب الغش والسرقة الأدبية والتعاون غير المصرح به وغيرها من أشكال عدم الأمانة الأكاديمية أن تكون خطيرة للغاية وسيتم التعامل معها وفقاً للسياسات واللوائح المذكورة آنفاً.</p>
<p><b>28. Attendance and Absence Regulations</b></p>	<p><b>28. نظام الحضور والغياب</b></p>
<p>Students are required to adhere to regular attendance for class lectures and practical sessions, as determined by the nature of the course, as per Article (33) of Regulations of <a href="#">Study and Examination at the University of Bahrain</a>.</p>	<p>يجب على الطلبة الالتزام بالحضور المنتظم للمحاضرات الصفية والعملية، حسبما تحدده طبيعة المقرر الدراسي، ووفقاً للمادة (33) من <a href="#">نظام الدراسة والامتحانات في جامعة البحرين</a>.</p>