KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ SPOŁECZNY

Nazwa przedmiotu	Kod ECTS
Chemia kwantowa	13.3.0728

Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot

Katedra Chemii Teoretycznej

Studia

wydział	kierunek		
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	poziom	wszystkie
		forma	wszystkie
		moduł specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie

Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)

prof. dr hab. Piotr Skurski; dr Sylwia Freza; dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni

Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin

Formy zajęć

Wykład, Ćw. audytoryjne

Sposób realizacji zajęć

zajęcia w sali dydaktycznej

Liczba godzin

Wykład: 30 godz., Ćw. audytoryjne: 15 godz.

Liczba punktów ECTS

4
zajęcia 45 godz.
konsultacje 10 godz.
praca własna studenta 45 godz.
RAZEM: 100 godz. - 4 ECTS

Termin realizacji przedmiotu

2021/2022 letni

Status przedmiotu

obowiązkowy

Język wykładowy

polski

Metody dydaktyczne

- Dyskusja
- Rozwiązywanie zadań
- Wykład z prezentacją multimedialną

Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne

Sposób zaliczenia

- Zaliczenie na ocenę
- Egzamin

Formy zaliczenia

- egzamin ustny
- kolokwium

Podstawowe kryteria oceny

Uzyskanie wymaganej (51%, zgodnie z Regulaminem Studiów) sumarycznej liczby punktów z kolokwiów pisemnych.
Uzyskanie pozytywnej oceny z egzaminu ustnego składającego się z pytań otwartych obejmujących wyłącznie zagadnienia wymienione w problematyce wykładu; do egzaminu może przystąpić student, który ma zaliczone ćwiczenia audytoryjne.

Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:
Student interpretuje zagadnienia z zakresu przedstawionego w treściach programowych na zaliczeniach pisemnych i egzaminie pisemnym (K_BCh_W02, K_ BCh_W03).
Sposoby weryfikacji nabycia umiejętności:
Student przygotowuje sprawozdanie z przeprowadzonych ćwiczeń laboratoryjnych stosując odpowiednią nomenklaturę (K_ BCh_U02, K_BCh_U08).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

Uzyskanie pozytywnej oceny z egzaminu ustnego składającego się z pytań otwartych obejmujących wyłącznie zagadnienia wymienione w problematyce wykładu; do egzaminu może przystąpić student, który ma zaliczone ćwiczenia audytoryjne.

B. Wymagania wstępne

elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego

Cele kształcenia

• Przedstawienie studentom terminologii i nomenklatury dotyczących chemii kwantowej
• Zaznajomienie studentów z podstawowymi metodami kwantowo-chemicznymi umożliwiającymi przewidywanie właściwości, struktury i reaktywności układów chemicznych

Treści programowe

A. Problematyka wykładu: dualizm korpuskularno - falowy, postulaty mechaniki kwantowej, rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej, cząstki w pudle potencjału, rotatora sztywnego, oscylatora harmonicznego i atomu wodoru; spin elektronu; termy atomowe; przybliżone metody chemii kwantowej: metody perturbacyjne i wariacyjne, metoda Ritza, metoda Hartree-Focka, metoda CI, MCSCF, CASSCF, metoda sprzężonych klasterów; wiązania chemiczne, cząsteczki dwuatomowe; teoria orbitali molekularnych; reaktywność cząsteczek
B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych: rachunek operatorowy, zagadnienie własne, reguły Jordana, operatory orbitalnego momentu pędu, ograniczenia na liczby kwantowe, równania własne dla atomu wodoru, orbitale, wyznaczanie termów atomowych, operatory spinu, symetria funkcji falowej, konstrukcja wyznacznika Slatera, obliczanie energii elektronowej, wyznaczanie gęstości π-elektronowych i rzędów wiązań metodą Hückla

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):
A.1. wykorzystywana podczas zajęć
Włodzimierz Kołos „Chemia kwantowa”
A.2. studiowana samodzielnie przez studenta
Włodzimierz Kołos „Chemia kwantowa”, Alojzy Gołębiewski „Elementy mechaniki i chemii kwantowej”
B. Literatura uzupełniająca
Lucjan Piela „Idee chemii kwantowej”
P.W. Atkins „Molekularna mechanika kwantowa”

Kierunkowe efekty uczenia się

K_BCh_W02 wymienia prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki i matematyki niezbędne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań inżynierskich
K_BCh_W03 opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych
K_BCh_U02 stosuje metody, techniki i narzędzia w formułowaniu i rozwiązywaniu zadań inżynierskich z zakresu chemii
K_BCh_U08 właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynieryjną

Wiedza

formułuje postulaty mechaniki kwantowej, wyjaśnia proste zastosowania chemii kwantowej, identyfikuje symetrię funkcji falowej, rozróżnia multipletowość stanów elektronowych, charakteryzuje podstawowe przybliżenia stosowane w chemii kwantowej, wyjaśnia efekt tunelowy, opisuje powierzchnie graniczne orbitali, formułuje zakaz Pauliego i regułę Hunda, charakteryzuje wartości średnie hamiltonianu i przemiennych z nim operatorów dla prostych układów, wymienia podstawowe metody chemii kwantowej

Umiejętności

rozwiązuje równania własne z operatorami obserwabli, przewiduje mierzalność wielkości fizycznych, szacuje prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w określonym obszarze, konstruuje wyznacznikową funkcję falową, oblicza energię elektronową molekuł, planuje właściwy dobór metody obliczeniowej

Kompetencje społeczne (postawy)

Kontakt

piotr.skurski@ug.edu.pl