



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		13.3.1002	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia kosmetyków, analityka i diagnostyka
		specjalnościowy	chemiczna, chemia żywności
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Piotr Skurski; mgr Marzena Marchaj; dr Marcin Czaplą; dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni; dr Sylwia Freza; mgr Jakub Brzeski			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		5	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 60 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 20 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 45 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 125 godz. - 5 ECTS	
Wykład: 30 godz., Ćw. audytoryjne: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2021/2022 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Dyskusja		Sposób zaliczenia	
- Rozwiązywanie zadań		- Zaliczenie na ocenę	
- Wykład z prezentacją multimedialną		- 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 rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej, wskazuje i wybiera algorytmy i programy umożliwiające wykonanie obliczeń i rozwiązanie problemu.(K_W08)			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia stosując metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej, dokonuje samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę zdobytą poza wykładem.(K_U01, K_U08, K_U09)			
Sposób weryfikacji kompetencji społecznych:			
Poprzez obserwację studenta na zajęciach, aktywność w dyskusji oraz obecność na konsultacjach.(K_K07)			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			

<p>A. Wymagania formalne brak</p>	
<p>B. Wymagania wstępne elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego</p>	
<p>Cele kształcenia</p> <ul style="list-style-type: none"> • Przedstawienie studentom terminologii i nomenklatury dotyczących chemii kwantowej • Zaznajomienie studentów z podstawowymi metodami kwantowochemicznymi umożliwiającymi przewidywanie właściwości, struktury i reaktywności układów chemicznych 	
<p>Treści programowe</p> <p>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; terminy 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</p> <p>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</p>	
<p>Wykaz literatury</p> <p>A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):</p> <p>A.1. wykorzystywana podczas zajęć: Włodzimierz Kołos „Chemia kwantowa”</p> <p>A.2. studiowana samodzielnie przez studenta : Włodzimierz Kołos „Chemia kwantowa”, Alojzy Gołębiowski „Elementy mechaniki i chemii kwantowej”</p> <p>B. Literatura uzupełniająca</p> <p>Lucjan Piel „Idee chemii kwantowej”</p> <p>P.W. Atkins „Molekularna mechanika kwantowa”</p>	
<p>Kierunkowe efekty uczenia się</p> <p>K_W08: wykazuje się znajomością metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki;</p> <p>K_U01: identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę;</p> <p>K_U08: przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii;</p> <p>K_U09: umie uczyć się samodzielnie;</p> <p>K_K07: docenia potrzebę przystępnego przedstawiania społeczeństwu wybranych zagadnień chemicznych;</p>	<p>Wiedza</p> <p>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</p>
	<p>Umiejętności</p> <p>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</p>
	<p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <p>rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje</p>
<p>Kontakt</p> <p>piotr.skurski@ug.edu.pl</p>	