


**KAPITAŁ LUDZKI**  
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez  
 Unię Europejską w ramach  
 Europejskiego Funduszu  
 Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
 EUROPEJSKI  
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


|  |                 |   |  |
|--|-----------------|---|--|
| <b>Nazwa przedmiotu</b>  |                 | <b>Kod ECTS</b>   |  |
| Chemia kwantowa  |                 | 13.3.1002   |  |
| <b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>   |                 |   |  |
| Katedra Chemii Teoretycznej  |                 |   |  |
| <b>Studia</b>  |                 |   |  |
| <b>wydział</b>   | <b>kierunek</b> | <b>poziom</b>   | <b>pierwszego stopnia</b>                                      |
| Wydział Chemii   | Chemia          | forma   | stacjonarne  |
|  |                 | moduł   | chemia biomedyczna, chemia kosmetyków, analityka i diagnostyka |
|  |                 | specjalnościowy   | chemiczna, chemia żywności                                     |
|  |                 | specjalizacja   | wszystkie  |
| <b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>  |                 |   |  |
| prof. dr hab. Piotr Skurski; dr Marcin Czapla; dr Jakub Brzeski; dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni; mgr Marzena Marchaj; dr Sylwia Freza  |                 |   |  |
| <b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>  |                 | <b>Liczba punktów ECTS</b>  |  |
| <b>Formy zajęć</b>   |                 | 5   |  |
| Wykład, Ćw. audytoryjne  |                 | zajęcia 60 godz.  |  |
| <b>Sposób realizacji zajęć</b>   |                 | konsultacje 20 godz.  |  |
| zajęcia w sali dydaktycznej  |                 | praca własna studenta 45 godz.  |  |
| <b>Liczba godzin</b>   |                 | RAZEM: 125 godz. - 5 ECTS   |  |
| Wykład: 30 godz., Ćw. audytoryjne: 30 godz.  |                 |   |  |
| <b>Termin realizacji przedmiotu</b>  |                 |   |  |
| 2022/2023 letni  |                 |   |  |
| <b>Status przedmiotu</b>   |                 | <b>Język wykładowy</b>  |  |
| obowiązkowy  |                 | polski  |  |
| <b>Metody dydaktyczne</b>  |                 | <b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>   |  |
| - Dyskusja   |                 | <b>Sposób zaliczenia</b>  |  |
| - Rozwiązywanie zadań  |                 | - Zaliczenie na ocenę   |  |
| - Wykład z prezentacją multimedialną   |                 | - Egzamin   |  |
|  |                 | <b>Formy zaliczenia</b>   |  |
|  |                 | - egzamin ustny   |  |
|  |                 | - kolokwium   |  |
|  |                 | <b>Podstawowe kryteria oceny</b>  |  |
|  |                 | Uzyskanie wymaganej (51%, zgodnie z Regulaminem Studiów) suma-rycznej 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. |  |
| <b>Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się</b>   |                 |   |  |
| 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)  |                 |   |  |
| <b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>  |                 |   |  |

|   |   |
|---|---|
| <b>A. Wymagania formalne</b><br>brak  |   |
| <b>B. Wymagania wstępne</b><br>elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego   |   |
| <b>Cele kształcenia</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Przedstawienie studentom terminologii i nomenklatury dotyczących chemii kwantowej</li> <li>• Zaznajomienie studentów z podstawowymi metodami kwantowochemicznymi umożliwiającymi przewidywanie właściwości, struktury i reaktywności układów chemicznych</li> </ul>  |   |
| <b>Treści programowe</b> <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 <math>\pi</math>-elektronowych i rzędów wiązań metodą Hückla</p> |   |
| <b>Wykaz literatury</b> <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>  |   |
| <b>Kierunkowe efekty uczenia się</b> <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>   | <b>Wiedza</b> <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 przemiannych z nim operatorów dla prostych układów, wymienia podstawowe metody chemii kwantowej</p> |
|   | <b>Umiejętności</b> <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>  |
|   | <b>Kompetencje społeczne (postawy)</b> <p>rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje</p>   |
| <b>Kontakt</b><br>piotr.skurski@ug.edu.pl   |   |