


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	poziom	wszystkie
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	wszystkie
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr hab. Iwona Anusiewicz, profesor uczelni; prof. dr hab. Piotr Skurski; dr Sylwia Freza			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		4	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 45 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 100 godz. - 4 ECTS	
Wykład: 30 godz., Ćw. audytoryjne: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2023/2024 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 pisemny z pytaniami (zadaniami) otwartymi	
		- kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Uzyskanie wymaganej (51%, zgodnie z Regulaminem Studiów) sumarycznej liczby punktów z kolokwium 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 pisemnego 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 <ul style="list-style-type: none"> • 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 <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, wyznaczenie termów atomowych, operatory spinu, symetria funkcji falowej, konstrukcja wyznacznika Slatera, obliczanie energii elektronowej, wyznaczenie gęstości π-elektronowych i rzędów wiązań metodą Hückla</p>	
Wykaz literatury <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 Lucjan Piel „Idee chemii kwantowej” P.W. Atkins „Molekularna mechanika kwantowa”</p>	
Kierunkowe efekty uczenia się <p>K_BCh_W02 wymienia prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki i matematyki niezbędne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań inżynierskich</p> <p>K_BCh_W03 opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych</p> <p>K_BCh_U02 stosuje metody, techniki i narzędzia w formułowaniu i rozwiązywaniu zadań inżynierskich z zakresu chemii</p> <p>K_BCh_U08 właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynierską</p>	Wiedza <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>
	Umiejętności <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>
	Kompetencje społeczne (postawy) <p>rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje</p>
Kontakt iwona.anusiewicz@ug.edu.pl	