



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		13.3.0480	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
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; prof. UG, dr hab. Iwona Anusiewicz; mgr Marcin Czapla; dr Sylwia Freza; mgr Olimpia Ciepla			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		5	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 70 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 125 godz. - 5 ECTS	
Ćw. audytoryjne: 15 godz., Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 letni			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
obowiązkowy	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
- Dyskusja - Rozwiązywanie zadań - Wykład z prezentacją multimedialną	Sposób zaliczenia		
	- Zaliczenie na ocenę		
	- Egzamin		
	Formy zaliczenia		
	- egzamin ustny		
	- kolokwium		
	Podstawowe kryteria oceny		
	Uzyskanie wymaganej (51%, zgodnie z Regulaminem Studiów) suma-rycznej 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 kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Poprawnie rozwiązuje zadania związane z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej (K_W08), potrafi wskazać i wybrać właściwe algorytmy i programy umożliwiające wykonanie obliczeń i rozwiązanie problemu (K_W09).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Podczas wykonywania zadań zaliczeniowych student prowadzi obliczenia stosując poprawnie opanowane metody i techniki rachunkowe chemii kwantowej (K_U05), potrafi dokonać samodzielnej interpretacji wyników w oparciu o własną wiedzę zdobytą poza wykładem (K_U09).			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			

(przedmioty, których wcześniejsze zaliczenie jest niezbędne): matematyka, fizyka

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 kwantowochemicznymi 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; 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
- 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 Piel „Idee chemii kwantowej”
- P.W. Atkins „Molekularna mechanika kwantowa”

Efekty kształcenia

(obszarowe i kierunkowe)

- K_W08: wykazuje się znajomością podstawowych metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki;
- K_W09: opisuje praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych;
- K_U05 stosuje podstawowe metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych;
- K_U09: umie uczyć się samodzielnie;
- K_K07 docenia potrzebę przystępnego przedstawiania społeczeństwu wybranych zagadnień chemicznych;

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 tunelu-wy, 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)

rozumie potrzebę dalszego kształcenia się, zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje

Kontakt

piotr.skurski@ug.edu.pl