

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia kwantowa (Wykład), PG_00080827						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2024/2025				
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów				
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski				
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS	3.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	egzamin				
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej -> Pracownia Chemii Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Od odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Iwona Anusiewicz					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. Iwona Anusiewicz					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM		
	Liczba godzin pracy studenta	30	5.0	40.0	75		
Cel przedmiotu	Przedstawienie studentom terminologii i nomenklatury dotyczących chemii kwantowej. Zapoznanie studentów z podstawowymi metodami kwantowo-chemicznymi umożliwiającymi przewidywanie właściwości, struktury i reaktywności układów chemicznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BCHINŻ_W03] Opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych.	wymienia podstawowe metody chemii kwantowej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHINŻ_U02] Stosuje metody, techniki i narzędzia w formułowaniu i rozwiązywaniu zadań inżynierskich z zakresu chemii.	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	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHINŻ_U08] Właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynierską.	formułuje postulaty mechaniki kwantowej, wyjaśnia proste zastosowania chemii kwantowej, identyfikuje symetrię funkcji falowej, rozróżnia multipletowość stanów elektronowych, charakteryzuje podstawowe przybliżenia stosowane w chemii kwantowej,	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
[BCHINŻ_W02] Wymienia prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki i matematyki niezbędne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań inżynierskich.	wyjaśnia efekt tunelowy, opisuje powierzchnie graniczne orbitali, formułuje zakaz Pauliego i regułę Hunda, charakteryzuje wartości średnie hamiltonianu i zmiennych z nim operatorów dla prostych układów,	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	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		
Wymagania wstępne i dodatkowe	elementarna znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego i całkowego		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Uzyskanie pozytywnej oceny z egzaminu pisemnego składającego się z pytań otwartych do egzaminu może przystąpić student, który ma zaliczone ćwiczenia audytoryjne.	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Włodzimierz Kołos Chemia kwantowa, Alojzy Gołębiewski Elementy mechaniki i chemii kwantowej	
	Uzupełniająca lista lektur	Lucjan Piela Idee chemii kwantowej P.W. Atkins Molekularna mechanika kwantowa	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Wyjaśnij pojęcia: Przybliżenie Borna-Oppenheimera; orbital; obserwabla; przybliżenie jednoelektronowe; spin.
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.