

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia kwantowa (Ćw. audytoryjne), PG_00080828						
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	1.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	zaliczenie				
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	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	0.0	15.0	0.0	0.0	0.0	15
	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	15	2.0	8.0	25		
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_U02] Stosuje metody, techniki i narzędzia w formułowaniu i rozwiązywaniu zadań inżynierskich z zakresu chemii.	planuje właściwy dobór metody obliczeniowej	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[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_U08] Właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynierską.	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_W02] Wymienia prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki i matematyki niezbędne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań inżynierskich.	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	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	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,		
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
	Dwa pisemne kolokwia	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Włodzimierz Kołos Chemia kwantowa, Alojzy Gołębiowski Elementy mechaniki i chemii kwantowej	
	Uzupełniająca lista lektur	Lucjan Pielą Idee chemii kwantowej P.W. Atkins Molekularna mechanika kwantowa	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Czy na drodze pomiaru można jednocześnie wyznaczyć składową $p(y)$ pędu elektronu oraz składową y położenia? Odpowiedź uzasadnij odpowiednim rachunkiem.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.