

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia kwantowa (Wykład), PG_00082078						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	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)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Sylwia Freza				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr hab. Sylwia Freza				
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	Celem wykładu jest zaznajomienie studentów z pojęciami dotyczącymi chemii kwantowej, podstawowymi przybliżeniami oraz wybranymi metodami obliczeniowymi kwantowochemicznymi.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[CHEML3_W08] Wykazuje się znajomością metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki.		wymienia podstawowe metody chemii kwantowej, wyjaśnia proste zastosowania chemii kwantowej, rozpoznaje symetrię funkcji falowej, opisuje postulaty mechaniki kwantowej, wyjaśnia efekt tunelowy,		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U01] Identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę.		Szacuje prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w określonym obszarze, oblicza energię elektronową molekuł		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U08] Przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii.		przewiduje mierzalność wielkości fizycznych, klasyfikuje multipletowość stanów, dyskutuje podstawowe przybliżenia stosowane w chemii kwantowej		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U09] Umie uczyć się samodzielnie.		Rozwiązuje równania własne z operatorami obserwabli, konstruuje wyznacznikową funkcję falową, planuje właściwy wybór metody obliczeniowej,		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_K07] Docenia potrzebę przystępnego przedstawiania społeczeństwu wybranych zagadnień chemicznych.		zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii, wykazuje otwartość na nowatorskie koncepcje		[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja		

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	Podstawowa znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego oraz całkowego		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Włodzimierz Kołos Chemia kwantowa A 2. Alojzy Gołębiowski Elementy mechaniki i chemii kwantowej	
	Uzupełniająca lista lektur	1. Lucjan Piela Idee chemii kwantowej 2. P.W. Atkins Molekularna mechanika kwantowa	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Na czym polega przybliżenie jednoelektronowe? 2. Opisz zasadę nieoznaczoności Heisenberga. 3. Omów liczby kwantowe.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.