

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia kwantowa (Ćw. audytoryjne), PG_00082079						
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			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
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 dr Jakub Brzeski					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	30.0	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		15.0	50
Cel przedmiotu	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_U09] Umie uczyć się samodzielnie.		planuje właściwy wybór metody obliczeniowej, rozpoznaje symetrię funkcji falowej		[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		[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U08] Przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii.		przewiduje mierzalność wielkości fizycznych		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_U01] Identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę.		rozwiązuje równania własne z operatorami obserwabli,		[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEML3_W08] Wykazuje się znajomością metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki.		opisuje powierzchnie graniczne orbitali, wyjaśnia zakaz Pauliego i regułę Hunda		[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	Podstawowa znajomość algebry liniowej, rachunku różniczkowego oraz całkowego		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	kolokwia	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. Znaleźć wartości własne  2. Obliczyć komutatory  3. Wyznaczyć termy  4. Obliczyć energię elektronową		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.