

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia kwantowa (Ćw. audytoryjne), PG_00082079						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
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						
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_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
	[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_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_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_U09] Umie uczyć się samodzielnie.	planuje właściwy wybór metody obliczeniowej, rozpoznaje symetrię funkcji falowej	[SU4] 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 Pielą Idee chemii kwantowej 2. P.W. Atkins Molekularna mechanika kwantowa	
	Adresy eZasobów		
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.