

Chemia teoretyczna  
Sylabus zajęć

**Informacje podstawowe**

|                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                 |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Kierunek studiów</b><br>Chemia<br><b>Specjalność</b><br>CHEMIA OGÓLNA<br><b>Jednostka organizacyjna</b><br>Wydział Chemii<br><b>Poziom studiów</b><br>studia drugiego stopnia<br><b>Forma studiów</b><br>studia stacjonarne<br><b>Profil studiów</b><br>profil ogólnoakademicki |                                                                                                                                                                     | <b>Cykl dydaktyczny</b><br>2024/25<br><b>Kod zajęć</b><br>02CHECOS.22P.00958.24<br><b>Języki wykładowe</b><br>polski<br><b>Obligatoryjność</b><br>Obowiązkowy<br><b>Blok zajęciowy</b><br>Przedmioty podstawowe |
| <b>Koordynator zajęć</b>                                                                                                                                                                                                                                                           | Marcin Hoffmann                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Prowadzący zajęcia</b>                                                                                                                                                                                                                                                          | Marcin Hoffmann                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                 |
| <b>Okres</b><br>Semestr 2                                                                                                                                                                                                                                                          | <b>Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Wykład: 15, Egzamin</li><li>Ćwiczenia: 45, Zaliczenie z oceną</li></ul> | <b>Liczba punktów ECTS</b><br>5                                                                                                                                                                                 |

## Cele kształcenia dla zajęć

| Kod | Cel                                                                                                                                        |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| C1  | Zapoznanie studentów z podstawami teorii kwantów oraz obliczeń kwantowo-mechanicznych.                                                     |
| C2  | Wykształcenie umiejętności doboru właściwej metody obliczeń kwantowo-mechanicznych do badanego obiektu.                                    |
| C3  | Wykształcenie umiejętności obsługi programu komputerowego Maple do obliczeń symbolicznych, w zakresie wyprowadzania równań matematycznych. |
| C4  | Opanowanie podstaw obliczeń in silico w zakresie substancji chemicznych, o znaczeniu kosmetycznym i leczniczym.                            |
| C5  | Wykształcenie umiejętności obsługi programu komputerowego Gaussian do obliczeń kwantowo-mechanicznych.                                     |
| C6  | Opanowanie podstaw spektroskopii teoretycznej w zakresie widm UV, IR, MW.                                                                  |

## Wymagania wstępne

Brak wymagań wstępnych.

## Efekty uczenia się dla zajęć

| Kod                               | Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie                                                                                                                  | Efekty uczenia się dla kierunku | Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć                  |
|-----------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Wiedzy - Student/ka:</b>       |                                                                                                                                                          |                                 |                                                                               |
| W1                                | zna i rozumie podstawowe prawa mechaniki kwantowej.                                                                                                      | CHE_K2_W01                      | Egzamin pisemny, Egzamin ustny                                                |
| <b>Umiejętności - Student/ka:</b> |                                                                                                                                                          |                                 |                                                                               |
| U1                                | potrafi objaśniać w jaki sposób ściśle rozwiązywać podstawowe modele w mechanice kwantowej, charakteryzować rozwiązania oraz wskazywać ich zastosowania. | CHE_K2_U06                      | Egzamin pisemny, Egzamin ustny, Kolokwium pisemne, Raport, Egzamin praktyczny |
| U2                                | potrafi stosować najważniejsze przybliżone metody obliczeniowe do rozwiązywania układów atomowych i molekularnych.                                       | CHE_K2_U02, CHE_K2_U06          | Egzamin pisemny, Egzamin ustny, Kolokwium pisemne, Raport, Egzamin praktyczny |
| U3                                | potrafi wybierać i stosować właściwe techniki obliczeniowe i modelowania do badania określonych właściwości układów atomowych i molekularnych.           | CHE_K2_U06, CHE_K2_U17          | Egzamin pisemny, Egzamin ustny, Kolokwium pisemne, Raport, Egzamin praktyczny |
| U4                                | potrafi prawidłowo interpretować wyniki obliczeń teoretycznych oraz eksperymentów.                                                                       | CHE_K2_U06, CHE_K2_U18          | Egzamin pisemny, Egzamin ustny, Kolokwium pisemne, Raport, Egzamin praktyczny |

| Kod | Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie                                | Efekty uczenia się dla kierunku | Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć                           |
|-----|------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| U5  | potrafi korzystać ze źródeł literaturowych, także w języku angielskim. | CHE_K2_U13,<br>CHE_K2_U14       | Egzamin pisemny,<br>Egzamin ustny,<br>Kolokwium pisemne,<br>Raport, Egzamin praktyczny |

### Treści programowe dla zajęć

| Lp. | Treści programowe dla zajęć                                                                                                                                                                                         | Efekty uczenia się dla zajęć | Formy zajęć       |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|-------------------|
| 1.  | Wprowadzenie do mechaniki kwantowej (zjawisko fotoelektryczne, dualizm korpuskularno-falowy, definicje), postulaty mechaniki kwantowej.                                                                             | W1                           | Wykład            |
| 2.  | Ścisłe rozwiązania równania Schrödingera: cząstka swobodna, zjawisko tunelowania, nieskończona studnia potencjału, analiza i wizualizacja rozwiązań równania Schrödingera atomu wodoru.                             | W1, U1                       | Wykład, Ćwiczenia |
| 3.  | Metody przybliżone rozwiązywania równania Schrödingera: metoda wariacyjna, przybliżenie jednoelektronowe, metoda Hartree-Focka, korelacja elektronowa, orbitale molekularne, baza funkcyjna.                        | W1, U2                       | Wykład, Ćwiczenia |
| 4.  | Pakiet obliczeniowy Gaussian: jego możliwości i zakres zastosowań, interfejs graficzny GaussView. Praktyczne obliczenia kwantowo-chemiczne z użyciem pakietu Gaussian, atomy wieloelektronowe, tablica Mendelejewa. | U1, U2, U3                   | Ćwiczenia         |
| 5.  | Separacja ruchu jąder i elektronów w molekułach, wiązania chemiczne, powierzchnia energii potencjalnej, poziomy energetyczne, stany wzbudzone, metoda oddziaływania konfiguracji (CI).                              | W1, U3                       | Wykład, Ćwiczenia |
| 6.  | Modelowanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek w fazie gazowej, struktura elektronowa, rozkład gęstości elektronowej.                                                                                         | U2, U3                       | Ćwiczenia         |
| 7.  | Modelowanie ścieżki reakcji, energia aktywacji dla złożonych układów molekularnych.                                                                                                                                 | U2, U3, U4                   | Ćwiczenia         |
| 8.  | Oddziaływania międzymolekularne.                                                                                                                                                                                    | W1, U3, U4                   | Wykład, Ćwiczenia |
| 9.  | Metoda supermolekularna, błąd superpozycji bazy.                                                                                                                                                                    | W1, U3, U4, U5               | Wykład, Ćwiczenia |
| 10. | Kwantowo-chemiczne modele ciała stałego, symetria translacyjna, sieć prosta i odwrotna, pierwsza strefa Brillouina.                                                                                                 | W1, U3, U5                   | Wykład, Ćwiczenia |
| 11. | Modelowanie i rola wiązań wodorowych, kompleksy molekularne.                                                                                                                                                        | W1, U4, U5                   | Wykład, Ćwiczenia |

### Informacje dodatkowe

| Forma zajęć | Metody i formy prowadzenia zajęć                                                                                      |
|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Wykład      | Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień, Dyskusja, Praca z tekstem, Demonstracje dźwiękowe i/lub video |
| Ćwiczenia   | Rozwiązywanie zadań (np.: obliczeniowych, artystycznych, praktycznych), Metoda ćwiczeniowa, Metoda laboratoryjna      |

| Forma zajęć | Warunki zaliczenia zajęć                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Wykład      | <p>Egzamin pisemny (pytania otwarte) oraz ustny.</p> <p>Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym punktów możliwych do zdobycia:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0%</li> <li>• dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9%</li> <li>• dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9%</li> <li>• dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9%</li> <li>• dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9%</li> <li>• niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%</li> </ul>                                                                                         |
| Ćwiczenia   | <p>Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie oceny pozytywnej z wszystkich kolokwii pisemnych oraz oddanie raportów z ćwiczeń.</p> <p>Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym punktów możliwych do zdobycia w trakcie zajęć:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0%</li> <li>• dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9%</li> <li>• dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9%</li> <li>• dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9%</li> <li>• dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9%</li> <li>• niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%</li> </ul> |

## Literatura

### Obowiązkowa

1. Kołos W. "Chemia kwantowa", PWN 1978.
2. Piela L. "Idee Chemii Kwantowej", PWN 2009.
3. Hayward D., "Mechanika kwantowa dla chemików", PWN 2007.
4. Kręglewski M., Makarewicz J., Pyżalski R., Rychlewski J., "Zadania z Chemii kwantowej" PWN 1984.

### Dodatkowa

1. Artykuły w czasopismach wskazane przez wykładowcę i prowadzącego laboratorium.

## Nakład pracy studenta i punkty ECTS

| Rodzaje zajęć studenta | Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć |
|------------------------|---------------------------------------------------------------------|
|------------------------|---------------------------------------------------------------------|

|                                     |                             |
|-------------------------------------|-----------------------------|
| Wykład                              | 15                          |
| Ćwiczenia                           | 45                          |
| Przygotowanie do zajęć              | 60                          |
| Czytanie wskazanej literatury       | 15                          |
| Przygotowanie raportu               | 15                          |
|                                     |                             |
| <b>Łączny nakład pracy studenta</b> | <b>Liczba godzin</b><br>150 |
| <b>Liczba punktów ECTS</b>          | <b>ECTS</b><br>5            |

\* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

## Efekty uczenia się dla kierunku

| Kod        | Treść                                                                                                                                                                                                                       |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| CHE_K2_U02 | Absolwent/ka potrafi analizować i uzasadniać właściwości fizyko chemiczne substancji na podstawie przeprowadzonych badań jej struktury                                                                                      |
| CHE_K2_U06 | Absolwent/ka potrafi stosować metody matematyczne w obliczeniach dla złożonych układów chemicznych i fizykochemicznych oraz krytycznie oceniać uzyskane wyniki                                                              |
| CHE_K2_U13 | Absolwent/ka potrafi posługiwać się technikami informacyjnymi w celu pogłębienia swojej wiedzy oraz zdobywać informacji na temat najnowszych odkryć w wybranej przez siebie specjalności                                    |
| CHE_K2_U14 | Absolwent/ka potrafi posługiwać się językiem angielskim oraz językiem nowożytnym na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego w dziedzinie chemii oraz dyscyplinie, w której prowadzi badania naukowe |
| CHE_K2_U17 | Absolwent/ka potrafi pogłębiać swoją specjalistyczną wiedzę w zakresie niezbędnym do rozwiązania i prawidłowej interpretacji podjętego problemu                                                                             |
| CHE_K2_U18 | Absolwent/ka potrafi wyrażać w przystępny sposób, zdobytą wiedzę oraz prezentować wyniki odkryć naukowych dotyczących chemii                                                                                                |
| CHE_K2_W01 | Absolwent/ka zna i rozumie pogłębione zagadnienia z opisujące zjawiska chemiczne                                                                                                                                            |