



UNIWERSYTET
IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

Modelowanie kwantowo chemiczne w analizach sądowych

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia Specjalność CHEMIA SĄDOWA Jednostka organizacyjna Wydział Chemii Poziom studiów studia pierwszego stopnia Forma studiów studia stacjonarne Profil studiów profil ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2023/24 Kod zajęć 02CHECSS.18P.01971.23 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Obowiązkowy Blok zajęciowy Przedmioty podstawowe
Koordynator zajęć	Marcin Hoffmann, Mariusz Puchalski	
Prowadzący zajęcia	Marcin Hoffmann, Mariusz Puchalski	
Okres Semestr 4	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia • Wykład: 15, Zaliczenie z oceną • Laboratorium: 30, Zaliczenie z oceną	Liczba punktów ECTS 4

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie podstawowej wiedzy z zakresu chemii kwantowej, metod obliczeniowych i modelowania w chemii kwantowej.
C2	Rozwinięcie umiejętności zastosowania metod obliczeniowych i właściwej interpretacji wyników.
C3	Wykształcenie umiejętności numerycznej i graficznej obróbki wyników obliczeń ab initio w chemii sądowej.

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
Wiedzy - Student/ka:			
W1	zna i rozumie istotę postulatów mechaniki kwantowej.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne
W2	zna i rozumie oddziaływania na poziomie atomowym i molekularnym oraz wskazuje wynikające z nich właściwości chemiczne.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W04, CHE_K1_W09	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi rozwiązywać podstawowe modele w mechanice kwantowej, charakteryzować rozwiązania oraz wskazywać ich zastosowania.	CHE_K1_U08, CHE_K1_U12	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Raport
U2	potrafi stosować najważniejsze przybliżone metody obliczeniowe do rozwiązywania złożonych układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_U08, CHE_K1_U12	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Raport
U3	potrafi przetworzyć numerycznie i opracować wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych.	CHE_K1_U08, CHE_K1_U10, CHE_K1_U12, CHE_K1_U17	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Raport
U4	potrafi graficznie przedstawić wyniki obliczeń ab initio, także w postaci animacji np. reakcji chemicznej.	CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10, CHE_K1_U12	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Raport
U5	potrafi korzystać ze źródeł literaturowych, także w języku angielskim.	CHE_K1_U20, CHE_K1_U21, CHE_K1_U24	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Raport
Kompetencji społecznych - Student/ka:			
K1	jest gotów/gotowa do pogłębienia własnej wiedzy na temat modelowania kwantowo-chemicznego.	CHE_K1_K06	Kolokwium ustne, Raport

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, oscylator harmoniczny, analiza i wizualizacja rozwiązań równania Schrödingera dla rotatora sztywnego oraz atomu wodoru.	W1, W2, U1	Wykład, Laboratorium

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
3.	Metody przybliżone rozwiązywania równania Schrödingera: metoda wariacyjna, rachunek zaburzeń, przybliżenie jednoelektronowe, metoda Hartree-Focka, korelacja elektronowa, orbitale molekularne, baza funkcyjna.	W1, W2, U1, U2	Wykład, Laboratorium
4.	Pakiet obliczeniowy Gaussian: jego możliwości i zakres zastosowań, interfejs graficzny GaussView, praktyczne obliczenia kwantowo-chemiczne z użyciem pakietu Gaussian, atomy wieloelektronowe, tablica Mendelejewa.	W1, W2, U2, U3	Wykład, Laboratorium
5.	Separacja ruchu jąder i elektronów w molekułach, wiązania chemiczne, powierzchnia energii potencjalnej, stałe siłowe, pola siłowe, poziomy energetyczne, stany wzbudzone, metoda oddziaływania konfiguracji (CI).	W1, W2, U2, U3, U4	Wykład, Laboratorium
6.	Modelowanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek w fazie gazowej, struktura elektronowa, rozkład gęstości elektronowej, analiza populacyjna, momenty multipolowe, przewidywanie reaktywności molekuł.	W1, W2, U2, U3, U4	Wykład, Laboratorium
7.	Modelowanie ścieżki reakcji, energia aktywacji dla złożonych układów molekularnych.	W1, W2, U1, U2, U3, U4	Wykład, Laboratorium
8.	Zastosowanie metod kwantowochemicznych do przewidywania właściwości spektroskopowych molekuł – spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR), w podczerwieni (IR) i w zakresie światła widzialnego i nadfioletowego (UV-Vis).	W1, W2, U4, U5, K1	Wykład, Laboratorium
9.	Modelowanie i rola wiązań wodorowych, kompleksy molekularne.	W1, W2, U4	Wykład, Laboratorium
10.	Obróbka numeryczna wyników obliczeń ab-initio, graficzna prezentacja wyników, warstwy gęstości elektronowej, gęstości różnicowe, projekcja właściwości na powierzchni gęstości, animacja reakcji chemicznej.	W1, W2, U3, U4, U5, K1	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

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

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunkiem przystąpienia do zaliczenia (kolokwium pisemne oraz kolokwium ustne) jest uzyskanie oceny pozytywnej z laboratorium. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 90,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 80,0% - 89,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 70,0% - 79,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 69,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 50,0% - 59,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 50,0%
Laboratorium	Warunki zaliczenia: • kolokwium ustne z ćwiczenia • raport z wykonanego ćwiczenia Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 90,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 80,0% - 89,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 70,0% - 79,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 69,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 50,0% - 59,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 50,0%

Literatura

Obowiązkowa

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

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	15
Laboratorium	30
Przygotowanie do zajęć	20
Czytanie wskazanej literatury	15
Przygotowanie pracy pisemnej	15

Przygotowanie do egzaminu	20
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 115
Liczba punktów ECTS	ECTS 4

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
CHE_K1_K06	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do formułowania pytań służących pogłębieniu własnego zrozumienia tematu lub odnalezieniu brakujących elementów rozumowania
CHE_K1_U02	Absolwent/ka potrafi przedstawić w przystępny sposób zdobytą wiedzę
CHE_K1_U03	Absolwent/ka potrafi określać i uzasadniać właściwości substancji na podstawie jej struktury
CHE_K1_U08	Absolwent/ka potrafi stosować metody matematyczne w obliczeniach chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U10	Absolwent/ka potrafi interpretować i analizować ilościowy opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_U12	Absolwent/ka potrafi wykonywać podstawowe obliczenia modelowe dla cząsteczek lub procesów chemicznych
CHE_K1_U17	Absolwent/ka potrafi dobierać metody analizy instrumentalnej do zbadania określonych zjawisk chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U20	Absolwent/ka potrafi wykorzystywać bazy danych do pozyskiwania informacji potrzebnych w pracy chemika
CHE_K1_U21	Absolwent/ka potrafi samodzielnie pozyskiwać informacje z literatury zarówno w języku polskim jak i obcym, tablic fizykochemicznych i innych dostępnych źródeł
CHE_K1_U24	Absolwent/ka potrafi posługiwać się językiem angielskim pozwalającym na czytanie literatury fachowej oraz nowożytnym językiem obcym na poziomie B2
CHE_K1_W01	Absolwent/ka zna i rozumie prawa i zagadnienia chemiczne
CHE_K1_W02	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia fizyki i ich powiązania z prawami chemicznymi
CHE_K1_W04	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu nauk przyrodniczych
CHE_K1_W09	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu kinetyki i katalizy chemicznej