



UNIWERSYTET
IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

Chemia kwantowa

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia Specjalność CHEMIA OGÓLNA Jednostka organizacyjna Wydział Chemii Poziom studiów studia pierwszego stopnia Forma studiów studia stacjonarne Profil studiów profil ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2023/24 Kod zajęć 02CHECOS.18P.01983.23 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Obowiązkowy Blok zajęciowy Przedmioty podstawowe
Koordynator zajęć	Jacek Komasa	
Prowadzący zajęcia	Jacek Komasa	
Okres Semestr 4	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia - Wykład: 30, Zaliczenie z oceną - Ćwiczenia: 45, Zaliczenie z oceną	Liczba punktów ECTS 6

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie wiedzy z zakresu podstaw chemii kwantowej; metod obliczeniowych i modelowania w chemii kwantowej.
C2	Rozwinięcie zdolności doboru właściwych modeli chemii kwantowej do badania określonych procesów kwantowych; rozwinięcie umiejętności zastosowania metod obliczeniowych do rozwiązywania zagadnień dotyczących efektywnego otrzymywania wyników metodami chemii kwantowej.
C3	Przygotowanie do właściwej interpretacji wyników badań eksperymentalnych i teoretycznych.
C4	Wyrobinienie umiejętności korzystania z narzędzi komputerowych do obliczeń i modelowania w chemii kwantowej.
C5	Rozwinięcie umiejętności komunikacji i pracy w grupie; przekazanie wiedzy z zakresu zasad bezpieczeństwa i higieny pracy w laboratorium.

Wymagania wstępne

Znajomość matematyki w zakresie liczb zespolonych, rachunku różniczkowego oraz całkowego (zaliczony przedmiot Matematyka).

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 istotę postulatów mechaniki kwantowej.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Test
W2	zna i rozumie jak ściśle rozwiązywać podstawowe modele w mechanice kwantowej, jak charakteryzować rozwiązania oraz wskazuje ich zastosowania.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W03	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Test
W3	zna i rozumie najważniejsze przybliżone metody obliczeniowe do rozwiązywania złożonych układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_W03	Projekt
W4	zna i rozumie właściwe techniki obliczeniowe i modelowania do badania określonych własności układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_W03, CHE_K1_W04, CHE_K1_W08	Projekt
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi objaśniać jak ściśle rozwiązywać podstawowe modele w mechanice kwantowej, jak charakteryzować rozwiązania oraz wskazywać ich zastosowania.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U08, CHE_K1_U12, CHE_K1_U21	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Test
U2	potrafi stosować najważniejsze przybliżone metody obliczeniowe do rozwiązywania złożonych układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U12, CHE_K1_U21	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Test, Projekt

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
U3	potrafi wybierać i stosować właściwe techniki obliczeniowe i modelowania do badania określonych własności układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U08, CHE_K1_U09, CHE_K1_U11, CHE_K1_U12, CHE_K1_U21	Projekt
U4	potrafi prawidłowo interpretować wyniki obliczeń teoretycznych oraz eksperymentów.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U08, CHE_K1_U09, CHE_K1_U10, CHE_K1_U11, CHE_K1_U12, CHE_K1_U21	Projekt
U5	potrafi korzystać ze źródeł literaturowych, także w języku angielskim.	CHE_K1_U19, CHE_K1_U21, CHE_K1_U22	Projekt
U6	potrafi obiektywnie oceniać wkład pracy własnej i innych w analizie otrzymanych wspólnie wyników teoretycznych.	CHE_K1_U19	Projekt
Kompetencji społecznych - Student/ka:			
K1	jest gotów/gotowa do dokonywania wyboru właściwej techniki obliczeniowej i modelowania do badania określonych własności układów atomowych i molekularnych.	CHE_K1_K01, CHE_K1_K02	Projekt
K2	jest gotów/gotowa do prowadzenia dyskusji otrzymanych wyników obliczeń teoretycznych oraz eksperymentów.	CHE_K1_K01, CHE_K1_K02, CHE_K1_K06	Projekt
K3	jest gotów/gotowa do obiektywnego oceniania wkładu pracy własnej i innych w analizie otrzymanych wspólnie wyników teoretycznych.	CHE_K1_K01, CHE_K1_K02, CHE_K1_K05, CHE_K1_K06	Projekt

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, Ćwiczenia
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, Ćwiczenia

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, W3, U2, U3, U4, K2	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.	W3, W4, U2, U3, U4, K1, K2	Wykład, Ćwiczenia
5.	Separacja ruchu jąder i elektronów w molekułach, wiązania chemiczne, powierzchnia energii potencjalnej, stałe siłowe, poziomy energetyczne, stany wzbudzone, metoda oddziaływania konfiguracji (CI).	W3, W4, U2, U3, U4, K1, K2	Wykład, Ćwiczenia
6.	Modelowanie właściwości fizykochemicznych cząsteczek w fazie gazowej, struktura elektronowa, rozkład gęstości elektronowej, analiza populacyjna, momenty multipolowe, przewidywanie reaktywności molekuł.	W3, W4, U3, U4, K1, K2	Wykład, Ćwiczenia
7.	Modelowanie ścieżki reakcji, energia aktywacji dla złożonych układów molekularnych.	W3, W4, U3, U4, K1, K2	Wykład, Ćwiczenia
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).	W3, W4, U2, U3, U4, U5, K1, K2	Wykład, Ćwiczenia
9.	Obróbka numeryczna wyników obliczeń ab-initio, graficzna prezentacja wyników, warstwy gęstości elektronowej, gęstości różnicowe, projekcja właściwości na powierzchni gęstości, animacja reakcji chemicznej.	W4, U3, U4, U5, U6, K2, K3	Wykład, Ćwiczenia

Informacje dodatkowe

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

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunkiem podejścia do zaliczenia jest uzyskanie oceny pozytywnej z ćwiczeń. Zaliczenie pisemnego egzaminu testowego z możliwością poprawy w formie ustnej. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%
Ćwiczenia	<u>Obecność na co najmniej 90% zajęć.</u> Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie oceny pozytywnej z wszystkich kolokwii oraz zaliczenie projektu indywidualnego. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%

Literatura

Obowiązkowa

1. L. Piela „Idee Chemii Kwantowej”, PWN, 2009.
2. D. Hayward „Mechanika kwantowa dla chemików”, PWN 2007.

Dodatkowa

1. W. Kołos „Chemia kwantowa”, PWN, 1978.

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	30
Ćwiczenia	45
Przygotowanie do zajęć	20
Czytanie wskazanej literatury	10

Przygotowanie raportu	30
Przygotowanie do zaliczenia	45
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 180
Liczba punktów ECTS	ECTS 6

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
CHE_K1_K01	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do zrozumienia potrzeby rozwoju nowych technologii chemicznych
CHE_K1_K02	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do przystępnego przedstawienia wybranych osiągnięć w chemii
CHE_K1_K05	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do stosowania etyki zawodowej w działaniach własnych i innych
CHE_K1_K06	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do formułowania pytań służących pogłębieniu własnego zrozumienia tematu lub odnalezieniu brakujących elementów rozumowania
CHE_K1_U01	Absolwent/ka potrafi stosować terminologię chemiczną zgodną z IUPAC i zaleceniami PTChem
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_U09	Absolwent/ka potrafi dobierać i stosować metody statystyczne do opisu zjawisk chemicznych, fizykochemicznych oraz analizy danych
CHE_K1_U10	Absolwent/ka potrafi interpretować i analizować ilościowy opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_U11	Absolwent/ka potrafi stosować specjalistyczne oprogramowanie komputerowe do wizualizacji i opisu procesów chemicznych
CHE_K1_U12	Absolwent/ka potrafi wykonywać podstawowe obliczenia modelowe dla cząsteczek lub procesów chemicznych
CHE_K1_U19	Absolwent/ka potrafi analizować i opracowywać wyniki badań oraz przygotowywać raport końcowy z prowadzonych eksperymentów chemicznych i fizykochemicznych
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_U22	Absolwent/ka potrafi przygotowywać konspekt z przeprowadzonych analiz danych literaturowych
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_W03	Absolwent/ka zna i rozumie techniki matematyki wyższej pozwalające na formalny opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_W04	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu nauk przyrodniczych
CHE_K1_W08	Absolwent/ka zna i rozumie właściwości chemiczne substancji w zależności od ich budowy/składu