



UNIWERSYTET
IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

Chemia teoretyczna

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia Specjalność - Jednostka organizacyjna Wydział Chemii Poziom studiów studia drugiego stopnia Forma studiów studia niestacjonarne Profil studiów profil ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2024/25 Kod zajęć 02CHEN.22P.00958.24 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Obowiązkowy Blok zajęciowy Przedmioty podstawowe
Koordynator zajęć	Marcin Hoffmann	
Prowadzący zajęcia	Marcin Hoffmann	
Okres Semestr 2	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia - Wykład: 15, Egzamin; w tym zajęcia zdalne: - Wykład synchroniczny: 15 - Ćwiczenia: 30, Zaliczenie z oceną	Liczba punktów ECTS 8

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
Wiedzy - Student/ka:			
W1	zna i rozumie podstawowe prawa mechaniki kwantowej.	CHE_K2_W01	Egzamin pisemny, Egzamin ustny
Umiejętności - Student/ka:			
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, CHE_K2_U14	Egzamin pisemny, Egzamin ustny, Kolokwium pisemne, 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, Wykład synchroniczny
2.	Ścisłe rozwiązania równania Schrödingera: cząstka swobodna, zjawisko tunelowania, nieskończona studnia potencjału, analiza i wizualizacja rozwiązań równania Schrödingera atomu wodoru.	W1, U1	Wykład, Ćwiczenia, Wykład synchroniczny
3.	Metody przybliżone rozwiązywania równania Schrödingera: metoda wariacyjna, przybliżenie jednoelektronowe, metoda Hartree-Focka, korelacja elektronowa, orbitale molekularne, baza funkcyjna.	W1, U2	Wykład, Ćwiczenia, Wykład synchroniczny
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, Wykład synchroniczny
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, Wykład synchroniczny
9.	Metoda supermolekularna, błąd superpozycji bazy.	W1, U3, U4, U5	Wykład, Ćwiczenia, Wykład synchroniczny
10.	Kwantowo-chemiczne modele ciała stałego, symetria translacyjna, sieć prosta i odwrotna, pierwsza strefa Brillouina.	W1, U3, U5	Wykład, Ćwiczenia, Wykład synchroniczny
11.	Modelowanie i rola wiązań wodorowych, kompleksy molekularne.	W1, U4, U5	Wykład, Ćwiczenia, Wykład synchroniczny

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	Egzamin pisemny (pytania otwarte) oraz ustny. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym punktów możliwych do zdobycia: • 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	Warunkiem zaliczenia jest uzyskanie oceny pozytywnej z wszystkich kolokwii pisemnych oraz oddanie raportów z ćwiczeń. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym punktów możliwych do zdobycia w trakcie zajęć: • 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. 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	30
Przygotowanie do zajęć	90
Czytanie wskazanej literatury	30
Przygotowanie raportu	30
Przygotowanie do egzaminu	45
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 240
Liczba punktów ECTS	ECTS 8

* 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