

KARTA PRZEDMIOTU

Kod przedmiotu	531.6.CHEM1.B/C.PCK	
Nazwa przedmiotu w języku	polskim	PODSTAWY CHEMII KWANTOWEJ
	angielskim	INTRODUCTION TO QUANTUM CHEMISTRY

1. USYTUOWANIE PRZEDMIOTU W SYSTEMIE STUDIÓW

1.1. Kierunek studiów	chemia
1.2. Forma studiów	stacjonarne / niestacjonarne
1.3. Poziom studiów	studia pierwszego stopnia licencjackie
1.4. Profil studiów	ogólnoakademicki
1.5. Osoba przygotowująca kartę przedmiotu	dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK
1.6. Kontakt	pawel.rodziewicz@ujk.edu.pl

2. OGÓLNA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU

2.1. Język wykładowy	polski
2.2. Wymagania wstępne	umiejętności w zakresie przedmiotów – Matematyka oraz Fizyka

3. SZCZEGÓŁOWA CHARAKTERYSTYKA PRZEDMIOTU

3.1. Forma zajęć	stacjonarne: wykład 20, konwersatorium 25 niestacjonarne: wykład 20, konwersatorium 25	
3.2. Miejsce realizacji zajęć	zajęcia w pomieszczeniu dydaktycznym UJK	
3.3. Forma zaliczenia zajęć	wykład – egzamin, konwersatorium – zaliczenie z oceną	
3.4. Metody dydaktyczne	wykład konwersatoryjny, ćwiczenia przedmiotowe, dyskusja grupowa	
3.5. Wykaz literatury	podstawowa	1. D. Hayward "Mechanika kwantowa dla chemików", PWN, 2007 2. W. Kołos "Chemia kwantowa", PWN, 2002
	uzupełniająca	1. L. Piel "Idee chemii kwantowej", PWN, 2012

4. CELE, TREŚCI I EFEKTY UCZENIA SIĘ

4.1. Cele przedmiotu (z uwzględnieniem formy zajęć)
Wykład:
C1. Poznanie podstaw wiedzy z mechaniki kwantowej niezbędnych do zrozumienia właściwości atomów oraz cząsteczek
C2. Kształtowanie postawy krytycznej wobec pozyskiwanych informacji
Konwersatorium:
C1. Nabywanie umiejętności rachunkowych z zakresu mechaniki kwantowej
C2 Kształtowanie krytycznej oceny elementów prowadzonego rozumowania
4.2. Treści programowe (z uwzględnieniem formy zajęć)
Wykład:
Fizyczne podstawy mechaniki kwantowej. Postulaty mechaniki kwantowej: funkcja falowa, operatory, równanie Schrödingera, funkcje i wartości własne operatora Hamiltona oraz zagadnienie wartości średniej. Cząstka w jednowymiarowym pudle potencjału. Rotator sztywny. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny. Efekt tunelowy. Równanie Schrödingera dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych. Rachunek zaburzeń. Metoda wariacyjna. Korelacja elektronowa. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Spin i zasada Pauliego. Teoria orbitali molekularnych. Metoda Hückla.
Konwersatorium:
Obliczenia dotyczące długości oraz częstotliwości fal. Zapis równania fali płaskiej. Działanie operatorów na wybrane funkcje. Działania na operatorach. Badanie komutacji wybranych operatorów. Badanie liniowości oraz hermitowskości operatorów. Działania na spinowych macierzach Pauliego. Obliczanie stałej normalizacyjnej funkcji falowej oraz postaci unormowanej funkcji falowej. Badanie ortogonalności funkcji falowej. Obliczanie gęstości prawdopodobieństwa funkcji falowej. Rozwiązywanie równania Schrödingera dla cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału. Obliczanie współczynnika tunelowania (transmisji) na podstawie równania Schrödingera w obszarze bariery potencjału. Analiza funkcji własnych oscylatora harmonicznego. Obliczenia poziomów energetycznych metodą Hückla.

4.3. Przedmiotowe efekty uczenia się

Efekt	Student, który zaliczył przedmiot	Odniesienie do kierunkowych efektów uczenia się
w zakresie WIEDZY:		
W01	Wymienia postulaty chemii kwantowej	CHEMIA_W10

W02	Podaje wyrażenie na równanie Schrödingera (niezależne od czasu) dla oscylatora harmonicznego	CHEMIA_W10
w zakresie UMIEJĘTNOŚCI :		
U01	Oblicza stałą normalizacyjną funkcji falowej oraz podaje postać unormowaną funkcji falowej	CHEMIA_U08
U02	Rozwiązuje zadania dotyczące zagadnienia komutacji operatorów	CHEMIA_U08
U03	Bada rozwiązania równania Schrödingera (niezależnego od czasu) dla cząstki swobodnej	CHEMIA_U08
w zakresie KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH :		
K01	Precyzyjnie formułuje pytania służące do pogłębienia zrozumienia danego tematu i krytycznej oceny elementów własnego rozumowania	CHEMIA_K01

4.4. Sposoby weryfikacji osiągnięcia przedmiotowych efektów uczenia się

Efekty przedmiotowe (symbol)	Sposób weryfikacji (+/-)																				
	Egzamin ustny/pisemny*			Kolokwium*			Projekt*			Aktywność na zajęciach*			Praca własna*			Praca w grupie*			Inne (jakie?)*		
	Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć			Forma zajęć		
	W	C	...	W	C	K	W	C	...	W	C	K	W	C	...	W	C	...	W	C	...
W01	+																				
W02	+																				
U01	+					+															
U02	+					+															
U03	+					+															
K01												+									

*niepotrzebne usunąć

4.5. Kryteria oceny stopnia osiągnięcia efektów uczenia się

Forma zajęć	Ocena	Kryterium oceny
wykład (W)	3	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów
	3,5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z pisemnego egzaminu zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów
Konwersatorium (K)	3	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 50-60% maksymalnej liczby punktów
	3,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 61-70% maksymalnej liczby punktów
	4	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 71-80% maksymalnej liczby punktów
	4,5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 81-90% maksymalnej liczby punktów
	5	Student z przeprowadzonego kolokwium pisemnego zdobywa 91-100% maksymalnej liczby punktów

5. BILANS PUNKTÓW ECTS – NAKŁAD PRACY STUDENTA

Kategoria	Obciążenie studenta	
	Studia stacjonarne	Studia niestacjonarne
LICZBA GODZIN REALIZOWANYCH PRZY BEZPOŚREDNIM UDZIALE NAUCZYCIELA /GODZINY KONTAKTOWE/	45	45
Udział w wykładach	20	20
Udział w konwersatorium	25	25
SAMODZIELNA PRACA STUDENTA /GODZINY NIEKONTAKTOWE/	55	55
Przygotowanie do wykładu	10	10
Przygotowanie do ćwiczeń	25	25
Przygotowanie do egzaminu/kolokwium	20	20
ŁĄCZNA LICZBA GODZIN	100	100
PUNKTY ECTS za przedmiot	4	4

Przyjmuję do realizacji (data i czytelne podpisy osób prowadzących przedmiot w danym roku akademickim)

