

2 up 
Prof. dr hab. inż. Stanisław Cudziło

Nazwa przedmiotu: *Chemia teoretyczna*
Nazwa w jęz. angielskim: *Theoretical chemistry*
Kod przedmiotu: WTCCOWSM-CHT

Dane dotyczące przedmiotu:
Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Obowiązuje od naboru: marzec 2017 (I stopień 2013)

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Stara teoria kwantów i wprowadzenie do modelu mechaniki kwantowej.
Postulaty mechaniki kwantowej. Równanie Schrodingera w mechanice kwantowej w zastosowaniu do interpretacji zjawisk fizycznych i budowy atomu i molekuly. Metody przybliżone w chemii teoretycznej. Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej. Kwantowe generatory Promieniowania. Elementy termodynamiki statystycznej.

Opis:

Narodziny fizyki współczesnej. Promieniowanie ciała doskonale czarnego, obserwacje Lenarda, eksperymenty Comptona, Sterna – Gerlacha, Dawidsona – Reyda – Tartakowskiego, Einsteina-deHassa, widma pierwiastków jako inspiracje rozwoju fizyki współczesnej. Model atomu Bohra. Hipoteza de Broglie’a i dualizm korpuskularno– falowy. Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Równanie Schrödingera i jego konsekwencje. Rachunek operatorowy w mechanice kwantowej. Reguła Jordana. 6 postulatów mechaniki kwantowej. Kluczowa rola modelu mechaniki kwantowej w interpretacji zjawisk w skali atomowej. Proste zastosowania mechaniki kwantowej do opisu układów modelowych (cząstka w pudle potencjału, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, efekt tunelowy). Atom wodoropodobny. Model sztywnego rotatora. Spin elektronu.

Metody przybliżone w chemii teoretycznej. Zarys metod wariacyjnych i metody zaburzeń. Atomy wieloelektronowe. Model wodorowy i układ okresowy. Przybliżenie Borna-Oppenheimera i adiatyczne a struktura molekuly. Minimalny model molekuly - orbitale molekularne (metoda Hartree-Focka, przybliżenie liniowej kombinacji orbitali atomowych - LCAO, MO, lokalizacja orbitali molekularnych). Wiązania chemiczne. Hybrydyzacja wiązań.

Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej. Szerokość linii widmowych.

Spektroskopia atomowa: reguły wyboru, struktura subtelna i sprzężenie spin-orbita, precesja. Spektroskopia molekularna: wprowadzenie do spektroskopii elektronowo-oscyłacyjno-rotacyjnej. Spektroskopia rotacyjna, model rotatora sztywnego i elastycznego, reguły wyboru, przykłady. Rotacyjna spektroskopia ramanowska, przypadki różnych typów molekuly. Efekt Starka. Spektroskopia oscylacyjna: struktura widma, reguły wyboru, potencjał Morse’a. Promieniowanie spójne i jego generacja. Lasery i masery. Równanie bilansu lasera.

Elementy termodynamiki statystycznej.

Cele:

Nauczyć: interpretacji obserwowanych zjawisk metodami chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej; wykorzystania metod chemii teoretycznej zagadnieniach spektroskopii, opisu budowy materii i jej oddziaływania z promieniowaniem elektromagnetycznym na bazie modelu mechaniki kwantowej; interpretacji zjawisk i metod w spektroskopii modelem mechaniki kwantowej.

Zapoznać z: podstawami technik obliczeniowych chemii teoretycznej, wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania do obliczeń kwantowo-molekularnych w zastosowaniach; zasadami funkcjonowania kwantowych generatorów promieniowania; podstawami termodynamiki statystycznej.

Literatura:

Literatura podstawowa:

1. H. Haken, H. Ch. Wolf, „Atom i cząsteczka”, PWN 1998 ,
2. H. Haken, H. Ch. Wolf, „Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej”, PWN 1998,
3. L. Piel, „Idee Chemii Kwantowej”, PWN, 2005,
4. K. Gumiński, „Elementy chemii teoretycznej”, dowolne wyd.
5. R. Nalewajski, Podstawy i metody chemii kwantowej. PWN 2001,

Literatura uzupełniająca:

6. E. Szpolski. Fizyka atomowa, dowolne wydanie,

7.	D. O. Hayward, Mechanika kwantowa dla chemików. PWN. 2007,	
8.	W. Kołos, „Chemia kwantowa”, dowolne wyd.,	
9.	P.W. Atkins, „Molekularna mechanika kwantowa”, PWN, 1974.	
Efekty kształcenia:		
Numer	Opis	Odniesienie do efektów kierunkowych
W1	<i>Zna podstawowe prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki, matematyki, wybiera techniki matematyki w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii;</i>	K_W02, K_W17
W2	<i>Zna kwantowe efekty oddziaływania światła z materią, rozumie procesy emisji i absorpcji promieniowania elektromagnetycznego i wiąże je z metodami spektroskopii, rozumie podstawy fizyczne badań różnych typów spektroskopii i metod interpretacji rezultatów badań, identyfikuje techniki obliczeniowe w spektroskopii.</i>	K_W12, K_W14
W3	<i>Rozumie zasady metod przybliżonych w mechanice kwantowej i modelowaniu molekularnym. Zna zasady metody wariacyjnej, zaburzeń, wykazuje się zrozumieniem podstawowych zasad metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii teoretycznej; identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę; przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych podstawowe fakty z chemii teoretycznej;</i>	K_W07, K_W18
W4	<i>Formułuje postulaty mechaniki kwantowej, wyjaśnia zastosowania chemii kwantowej, wyróżnia zwyrodnienie i multipletowość stanów elektronowych, charakteryzuje podstawowe przybliżenia stosowane w chemii kwantowej, wyjaśnia efekt tunelowy, opisuje powierzchnie graniczne orbitali, formułuje zakaz Pauliego i regułę Hunda, charakteryzuje wartości średnie hamiltonianu i przemiennych z nim operatorów dla prostych układów, wymienia podstawowe metody chemii kwantowej.</i>	K_W07, K_W12
W5	<i>Identyfikuje narzędzia i metody numeryczne w obliczeniach kwantowo mechanicznych w zastosowaniu do badania właściwości materiałów.</i>	K_W08, K_W09,
U1	<i>Identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o literaturę i zdobytą wiedzę.</i>	K_U10
U2	<i>Umie posługiwać się (w podstawowym zakresie) komercyjnym oprogramowaniem do modelowania molekularnego i rozumie podstawowe zasady jego funkcjonowania, możliwości i ograniczenia.</i>	K_U08, K_U09, K_U14
U3	<i>Potrafi przygotować i wygłosić prezentację dotyczącą podstawowych zagadnień chemii kwantowej i teoretycznej.</i>	K_U09
K1	<i>Umie się uczyć samodzielnie.</i>	K_K01
Metody i kryteria oceniania:		
Egzamin pisemny z częścią ustną. Pozytywna ocena z ćwiczeń laboratoryjnych warunkowana jest zaliczeniem testów kontrolnych wykonywanych każdorazowo przed wykonaniem ćwiczenia laboratoryjnego, wykonaniem wszystkich ćwiczeń praktycznych, wykonaniem i pozytywnym zaliczeniem wszystkich sprawozdań z ćwiczeń laboratoryjnych. Zaliczenie ćwiczeń rachunkowych odbywa się na podstawie zaliczenia kolokwium sprawdzającego. Kryteria oceny obejmują pełną obecność na zajęciach, oraz ocena bieżących postępów w podnoszeniu wiedzy oraz jej trwałość manifestowane podczas zajęć audytoryjnych. Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest uzyskanie pozytywnej oceny z ćwiczeń rachunkowych i laboratoriów oraz uzyskanie pozytywnej oceny z pracy semestralnej. Osiągnięcie efektów W1, W3, W2, W4, W5, U1, K2 sprawdzane jest podczas egzaminu pisemnego z częścią ustną. Natomiast sprawdzenie efektów W5, U2 sprawdzane jest podczas zaliczenia ćwiczeń laboratoryjnych. Pozytywna ocena z zaliczenia egzaminu może być wystawiona pod warunkiem uzyskania minimum 60% punktów określonych na arkuszu egzaminacyjnym, przy jednoczesnym wykazaniu zrozumienia podstawowych pojęć i definicji w zakresie całego materiału wykładowego, które sprawdzane jest podczas części ustnej.		
Praktyki zawodowe:		
brak		
Forma studiów		
stacjonarne		

Rodzaj studiów								
II stopnia								
Rodzaj przedmiotu								
obowiązkowy								
Przedmioty wprowadzające								
Matematyka: Ciągi i szeregi liczbowe, szeregi potęgowe i trygonometryczne. Rachunek różniczkowy funkcji jednej zmiennej (funkcje elementarne, ciągłość i granica funkcji, pochodna funkcji i jej zastosowania). Rachunek całkowy funkcji jednej zmiennej (całka oznaczona i nieoznaczona, podstawowe metody obliczania całek, zastosowania całek oznaczonych). Liczby zespolone. Algebra liniowa (macierze i podstawowe pojęcia z nimi związane, układy równań, wyznaczniki, wartości i wektory własne). Funkcje wielu zmiennych (ciągłość i granica funkcji, pochodne cząstkowe, pochodna i jej zastosowania, ekstrema funkcji). Całki podwójne i potrójne. Równania różniczkowe (podstawowe typy równań całkowalnych elementarnie, równania liniowe wyższych rzędów, układy równań liniowych o stałych współczynnikach). Elementy geometrii analitycznej i przestrzennej. Podstawy teorii grup. Szeregi Fouriera i Taylora. Elementy rachunku prawdopodobieństwa. Fizyka: Wymagania wstępne: Obszar zainteresowań i metody badawcze fizyki. Zasady zachowania energii, pędu i momentu pędu. Mechanika punktów materialnych i dynamika bryły sztywnej. Oddziaływanie grawitacyjne, elektryczne i magnetyczne. Sprężyste własności materii. Drgania i fale w ośrodkach sprężystych. Polaryzacja, interferencja i dyfrakcja fal. Podstawy teorii pola elektromagnetycznego. Elektryczne i magnetyczne właściwości materii.								
Programy								
kierunek: Chemia								
specjalność: Ochrona przed skażeniami								
Forma zajęć liczba godzin/rygor								
semestr	x- egzamin, + zaliczenie, # projekt						ECTS	
	razem	wykłady	ćwiczenia	laboratoria	projekt	seminarium		
II	76	36 / x	24 / +	16 / +			6	
Autor								
dr hab. inż. Wiktor Piecek								
Bilans ECTS								
Lp.	Aktywność						Obciążenie w godz.	
1	Udział w wykładach						36	
2	Samodzielne studiowanie tematyki wykładów						36	
3	Udział w ćwiczeniach						24	
4	Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń						24	
5	Udział w laboratoriach						16	
6	Samodzielne przygotowanie się do laboratoriów						12	
7	Udział w seminariach							
8	Samodzielne przygotowanie się do seminariów							
9	Realizacja projektu							
10	Udział w konsultacjach						6	
11	Przygotowanie do egzaminu						10	
12	Udział w egzaminie						2	
							Godz.	ECTS
Sumaryczne obciążenie pracą studenta							166	6
Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1+3+5+7+9+10+12							84	3
Zajęcia o charakterze praktycznym: 5+6+9							28	1
Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 1+2+3+4+7+8							120	4,5

AUTOR

KARTY INFORMACYJNEJ


dr hab. inż. Wiktor PIECEK

KIEROWNIK JEDNOSTKI ORGANIZACYJNEJ
ODPOWIEDZIALNEJ ZA PRZEDMIOT


Prof. dr hab. inż. Leszek JAROSZEWICZ