

2 
Prof. dr hab. inż. Stanisław Cudziło

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

Dane dotyczące przedmiotu:
Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Obowiązuje od naboru: październik 2016

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:		
Zaliczenie na ocenę		
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. Podstawy modelowania molekularnego z wykorzystaniem oprogramowania komercyjnego.		
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. 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 adiabatyczne a struktura molekuł. Minimalny model molekuly - orbitale molekularne (metoda Hartree-Focka, przybliżenie liniowej kombinacji orbitali atomowych - LCAO, MO, lokalizacja orbitali molekularnych). Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej. Spektroskopia atomowa: reguły wyboru, struktura subtelna i sprzężenie spin-orbita, precesja. Spektroskopia molekularna: wprowadzenie do spektroskopii elektronowo-oscylacyjno-rotacyjnej. Cele: Nauczyć: interpretacji obserwowanych zjawisk modelem mechaniki kwantowej; opisu budowy materii i jej oddziaływania z promieniowaniem elektromagnetycznym na bazie modelu mechaniki kwantowej; interpretacji zjawisk i metod w spektroskopii modelem mechaniki kwantowej; interpretacji zjawisk modelem chemii teoretycznej i mechaniki kwantowej w zagadnieniach spektroskopii,. Zapoznać z: podstawami technik obliczeniowych chemii teoretycznej, wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania do obliczeń kwantowo-molekularnych w zastosowaniach; zasadami funkcjonowania kwantowych generatorów promieniowania;		
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. 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.,		
Efekty kształcenia:		
Numer	Opis	Odniesienie do efektów kierunkowych
W1	Poszerzył wiedzę w zakresie fizycznych własności ciał stałych w szczególności w zakresie oddziaływań światła z materiałami. Poznał podstawy właściwości optycznych materiałów krystalicznych, podstawy teoretyczne opisu optycznych właściwości materiałów. Zna podstawowe prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki, matematyki, wybiera techniki matematyki w	K_W03

	<i>zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia inżynierii materiałowej.</i>	
W2	<i>Ma opanowaną wiedzę w zakresie teorii wiązań chemicznych, teoretycznych podstaw spektroskopii molekularnej. Jest zapoznany z podstawami technik obliczeniowych chemii teoretycznej oraz zastosowaniami mechaniki kwantowej w inżynierii materiałowej.</i>	K_W04, K_W06
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 modelowania molekularnego, identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej wiedzy o materiałach w oparciu o zdobytą wiedzę; przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk ścisłych, podstawowe zagadnienia dotyczące budowy materii i oddziaływania światła z materią, modelu mechaniki kwantowej, tym zasady dualizmu korpuskularno falowego i zasady nieoznaczoności Heisenberga.</i>	K_W04, K_W06, K_W09
W4	<i>Identyfikuje narzędzia i metody numeryczne w obliczeniach kwantowo mechanicznych w zastosowaniu do badania właściwości materiałów.</i>	K_W04, K_W06, K_W08, K_W09
U1	<i>Identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej inżynierii materiałowej w oparciu o literaturę i zdobytą wiedzę.</i>	K_U03,
U2	<i>Potrafi planować i przeprowadzać symulacje komputerowe, interpretować uzyskane wyniki i wyciągać wnioski. Umie posługiwać się (w podstawowym zakresie) komercyjnym oprogramowaniem do modelowania molekularnego i rozumie podstawowe zasady jego funkcjonowania, możliwości i ograniczenia.</i>	K_U07
U3	<i>Potrafi przygotować i wygłosić prezentację dotyczącą podstawowych zagadnień modelu mechaniki kwantowej.</i>	K_U05
K1	<i>Potrafi określić kierunki dalszego uczenia się i realizować proces samokształcenia.</i>	K_K01

Metody i kryteria oceniania:

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.

Zaliczenie wykładu odbywa się po sprawdzeniu osiągnięcia efektów W1, W2, W3, W4, U1, K1 jest podczas sprawdzianu 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 wykazania 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. 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 właściwości materii. Drgania i fale w ośrodkach sprężystych. Polaryzacja, interferencja i dyfrakcja fal. Podstawy teorii pola elektromagnetycznego. Elektryczne i magnetyczne właściwości materii.

Programy

kierunek: inżynieria materiałowa

specjalność: nowe materiały i technologie

Forma zajęć liczba godzin/rygor							
semestr	x- egzamin, + zaliczenie, # projekt						ECTS
	razem	wykłady	ćwiczenia	laboratoria	projekt	seminarium	
I	46	26 / +	12 / +	8 / +			3
Autor							
dr hab. inż. Wiktor Piecek							
Bilans ECTS							
Lp.	Aktywność					Obciążenie w godz.	
1	Udział w wykładach					26	
2	Samodzielne studiowanie tematyki wykładów					20	
3	Udział w ćwiczeniach					12	
4	Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń					16	
5	Udział w laboratoriach					8	
6	Samodzielne przygotowanie się do laboratoriów					8	
7	Udział w seminariach						
8	Samodzielne przygotowanie się do seminariów						
9	Realizacja projektu						
10	Udział w konsultacjach					4	
11	Przygotowanie do egzaminu						
12	Udział w egzaminie						
						Godz.	ECTS
Sumaryczne obciążenie pracą studenta						94	3
Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1+3+5+7+9+10+12						50	2
Zajęcia o charakterze praktycznym: 5+6+9						16	0,5
Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 1+2+3+4+7+8						74	2,5

AUTOR
KARTY INFORMACYJNEJ

dr hab. inż. Wiktor PIECEK, prof. WAT

KIEROWNIK JEDNOSTKI ORGANIZACYJNEJ
ODPOWIEDZIALNEJ ZA PRZEDMIOT

prof. dr hab. inż. Leszek R. Jaroszewicz