

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Chemia teoretyczna (WTCCXCSM-ChT)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Theoretical Chemistry

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Cykl dydaktyczny: Semestr zimowy 2024/2025

Koordynator przedmiotu cyklu: dr inż. Wiktor Piecek

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Stara teoria kwantów i wprowadzenie do modelu mechaniki kwantowej.

Postulaty mechaniki kwantowej. Równanie Schrödingera 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.

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 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. 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 uczenia się:

W1 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;

W2 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.

W3 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;

W4 Formuluje 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, formuluje zakaz Pauliego i regułę Hunda, charakteryzuje wartości średnie hamiltonianu i przemiennych z nim operatorów dla prostych układów, wymienia podstawowe metody chemii kwantowej.

W5 Identyfikuje narzędzia i metody numeryczne w obliczeniach kwantowo mechanicznych w zastosowaniu do badania właściwości materiałów.

U1 Identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o literaturę i zdobytą wiedzę.

U2 Umie posługiwać się (w podstawowym zakresie) komercyjnym oprogramowaniem do modelowania molekularnego i rozumie podstawowe zasady jego funkcjonowania, możliwości i ograniczenia.

K1 Potrafi przygotować i wygłosić prezentację dotyczącą podstawowych zagadnień chemii kwantowej i teoretycznej.

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, W3, W2, W4, W5, U1, K2 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:
nie dotyczy
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 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: wszystkie specjalności

Forma zajęć liczba godzin/rygor
Wykład 26 godzin Ćwiczenia 12 godzin Laboratorium 8

Autor
dr hab. inż. Wiktor Piecek

Bilans ECTS
Lp. Aktywność Obciążenie w godz. 1 Udział w wykładach 12 2 Samodzielne studiowanie tematyki wykładów 70 3 Udział w ćwiczeniach 6 4 Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń 30 5 Udział w laboratoriach 12 6 Samodzielne przygotowanie się do laboratoriów 30 7 Udział w seminariach 8 Samodzielne przygotowanie się do seminariów 9 Realizacja projektu 10 Udział w konsultacjach 10 11 Przygotowanie do egzaminu 12 Udział w egzaminie Godz. ECTS Sumaryczne obciążenie pracą studenta 170 6 Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1+3+5+7+9+10+12 40 1,5 Zajęcia o charakterze praktycznym: 5+6+9 42 1,5 Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 118 4

Dane dotyczące przedmiotu cyklu:
Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:
Egzamin
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.
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 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:

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.,