

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Wstęp do chemii teoretycznej (WTCCXCSI-WdChT)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Introduction to 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 2027/2028

Koordynator przedmiotu cyklu: mgr inż. Natan Rychłowicz

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.

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 Born-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.

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.,

Efekty uczenia się:

W1 / Student opanował wiedzę z matematyki pozwalającą na posługiwanie się metodami obliczeniowymi w chemii, wykorzystywanie ich do opisu zjawisk, procesów fizykochemicznych i technologicznych. Poznał i rozumie zasadnicze twierdzenia algebry liniowej i geometrii analitycznej. Zna podstawowe pojęcia i twierdzenia rachunku różniczkowego i całkowego. Zna elementy statystyki matematycznej i rachunku prawdopodobieństwa. / K_W07

W2 / Student posiada uporządkowaną wiedzę z zakresu fizyki klasycznej, relatywistycznej i kwantowej umożliwiającą rozumienie zjawisk i procesów fizycznych w przyrodzie oraz pomiar podstawowych wielkości fizykochemicznych. / K_W08

U1 / Student potrafi uczyć się samodzielnie. Umie korzystać z literatury fachowej, baz danych oraz innych źródeł informacji w celu pozyskania niezbędnych danych oraz ma podstawową zdolność oceny rzetelności pozyskanych informacji. / K_U09

U2 / Student potrafi wykorzystać do formułowania i rozwiązywania zadań inżynierskich metody analityczne, symulacyjne oraz eksperymentalne. Potrafi opisać matematycznie proste problemy z zakresu chemii, inżynierii i technologii chemicznej. Umie dokonać krytycznej analizy wyników obliczeń teoretycznych oraz zweryfikować je w oparciu o badania eksperymentalne. / K_U11

K1 / Student ma świadomość poziomu swej wiedzy i umiejętności oraz potrafi krytycznie je ocenić. Uznaje znaczenie wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych. / K_K01

K2 / Student zdaje sobie sprawę z ciągłego postępu wiedzy i rozumie potrzebę ciągłego doskonalenia się, podnoszenia kompetencji zawodowych i osobistych. / K_K05

Metody i kryteria oceniania:

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 trwałości manifestowane podczas zajęć audytoryjnych.

Zaliczenie wykładu odbywa się po sprawdzeniu osiągnięcia efektów W1, W3, W2, W4, W5, U1, K2 podczas sprawdzianu pisemnego z częścią ustną. 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.

Forma studiów

stacjonarne

Rodzaj studiów

I stopnia

Rodzaj przedmiotu

obowiązkowy

Przedmioty wprowadzające
Matematyka 1, Matematyka 2, Matematyka 3: 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 1, Fizyka 2: 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
kierunki studiów: chemia
Forma zajęć liczba godzin/rygor
wykład: 34 godz. / egzamin ćwiczenia 12 godz. / zaliczenie na ocenę
Autor
mgr inż Natan Rychłowicz
Bilans ECTS
Aktywność/ Obciążenie w godz. 1. Udział w wykładach / 34 2. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów / 16 3. Udział w ćwiczeniach / 12 4. Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń / 12 5. Przygotowanie do egzaminu / 14 6. Udział w egzaminie / 2 Godz. / ECTS Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 90 / 3 ECTS Zajęcia z udziałem nauczycieli: 48 / 1,5 ECTS Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 90 / 3 ECTS
Dane dotyczące przedmiotu cyklu:
Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:
Egzamin

.....
Podpis