

SYLABUS PRZEDMIOTU Chemia kwantowa

1.	Nazwa przedmiotu/modułu w języku polskim oraz angielskim Chemia kwantowa Quantum chemistry
2.	Dyscyplina naukowa Nauki chemiczne
3.	Język wykładowy polski
4.	Jednostka prowadząca przedmiot Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego
5.	Rodzaj przedmiotu/modułu obowiązkowy
6.	Kierunek studiów (specjalność/specjalizacja) chemia medyczna
7.	Poziom studiów I stopień
8.	Rok studiów (<i>jeśli obowiązuje</i>) I
9.	Semestr (<i>zimowy lub letni</i>) letni
10.	Forma zajęć i liczba godzin Metody kształcenia Wykład: 30 h Ćwiczenia: 30 h
11.	Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych dla przedmiotu/modułu Zaliczone kursy z: matematyki i podstaw chemii
12.	Cele przedmiotu Zaznajomienie z podstawami chemii kwantowej, umiejętność rozwiązywania równania Schrödingera dla prostych układów, wstęp teoretyczny do spektroskopii molekularnej, teoria budowy atomu.
13.	Treści programowe Wykład: Postulaty mechaniki kwantowej. Rozwiązanie równania Schrödingera dla: cząstki swobodnej, nieskończenie głębokiej studni potencjału, bariery potencjału (efekt tunelowania, przykłady z chemii) i oscylatora harmonicznego. Moment pędu, rotator sztywny. Atom jednoelektronowy - sposób rozwiązania równania Schrödingera, dyskusja rozwiązań, własności orbitali. Metody przybliżonego rozwiązania równania Schrödingera - metoda wariacyjna (twierdzenie wariacyjne, metoda Ritza), rachunek zaburzeń dla stanów niezdegenerowanych. Spin elektronowy. Sprzężenie spinowo-orbitalne. Układy

	wieloelektronowe, przybliżenie jednoelektronowe. Przybliżenie Borna-Oppenheimera, całkowita energia cząsteczki.																					
14.	<p>Zakładane efekty kształcenia</p> <p>Posiada wiedzę w zakresie podstaw chemii kwantowej i struktury elektronowej układów atomowych i molekularnych.</p> <p>Posiada umiejętność posługiwania się formalizmem chemii kwantowej.</p>	<p>Symbole odpowiednich kierunkowych efektów kształcenia,</p> <p>K_W01, K_W02, K_W04, K_W08</p> <p>K_U04, K_U08</p>																				
15.	<p>Literatura obowiązkowa i zalecana (<i>źródła, opracowania, podręczniki, itp.</i>)</p> <p>I.N. Levine, "Quantum chemistry", 7th ed., Pearson Education, Boston 2014.</p> <p>D.O. Hayword, "Mechanika kwantowa dla chemików", PWN, Warszawa, 2007.</p> <p>W. Kołos, "Chemia kwantowa", PWN, Warszawa, 1991.</p> <p>W. Kołos, J.Sadlej, "Atom i cząsteczka", WNT, Warszawa, 1998.</p> <p>L. Pielą, "Idee chemii kwantowej", PWN, Warszawa, 2011.</p>																					
16.	<p>Metody weryfikacji zakładanych efektów kształcenia:</p> <ul style="list-style-type: none"> - K_W01, K_W02, K_WK_W04, K_W08, egzamin pisemny (wykład) - K_U04, K_U08 kolokwia i dyskusja w czasie Ćwiczeń 																					
17.	<p>Warunki i forma zaliczenia poszczególnych komponentów przedmiotu/modułu:</p> <p>Wykład: egzamin pisemny.</p> <p>Ćwiczenia: Ewaluacja ciągła i kolokwia.</p>																					
18.	<p>Nakład pracy studenta</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 60%;">forma działań studenta</th> <th style="width: 40%;">liczba godzin na realizację działań</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td colspan="2">zajęcia (wg planu studiów) z prowadzącym:</td> </tr> <tr> <td>- wykład:</td> <td>30 h</td> </tr> <tr> <td>- ćwiczenia:</td> <td>30 h</td> </tr> <tr> <td colspan="2">praca własna studenta (w tym udział w pracach grupowych) np.:</td> </tr> <tr> <td>- przygotowanie do zajęć:</td> <td>10 h</td> </tr> <tr> <td>- rozwiązywanie zadań na ćwiczenia</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>- przygotowanie do sprawdzianów i egzaminu:</td> <td>20 h</td> </tr> <tr> <td>Łączna liczba godzin</td> <td>100 h</td> </tr> <tr> <td>Liczba punktów ECTS</td> <td>4</td> </tr> </tbody> </table>		forma działań studenta	liczba godzin na realizację działań	zajęcia (wg planu studiów) z prowadzącym:		- wykład:	30 h	- ćwiczenia:	30 h	praca własna studenta (w tym udział w pracach grupowych) np.:		- przygotowanie do zajęć:	10 h	- rozwiązywanie zadań na ćwiczenia	10	- przygotowanie do sprawdzianów i egzaminu:	20 h	Łączna liczba godzin	100 h	Liczba punktów ECTS	4
forma działań studenta	liczba godzin na realizację działań																					
zajęcia (wg planu studiów) z prowadzącym:																						
- wykład:	30 h																					
- ćwiczenia:	30 h																					
praca własna studenta (w tym udział w pracach grupowych) np.:																						
- przygotowanie do zajęć:	10 h																					
- rozwiązywanie zadań na ćwiczenia	10																					
- przygotowanie do sprawdzianów i egzaminu:	20 h																					
Łączna liczba godzin	100 h																					
Liczba punktów ECTS	4																					