

## KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: **Chemia kwantowa (C-CK.II2-ChKw)**

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: **Quantum chemistry**

### Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Chemii

#### Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

#### Język wykładowy:

polski

#### Opis:

Chemia kwantowa jest podstawową nauką pozwalającą zrozumieć i opisać strukturę materii. W dobie gwałtownego i niebywałego rozwoju technologii komputerowych metody obliczeniowe chemii kwantowej stały się narzędziem badawczym równie ważnym i użytecznym jak wszelkiego rodzaju techniki eksperymentalne. Ponadto chemia kwantowa ułatwia interpretację wyników doświadczalnych (przypisanie sygnałów w widmie IR odpowiednim drganiom normalnym, czy też sygnałów w widmie NMR odpowiednim jądom atomowym). Rola chemii kwantowej we współczesnej nauce powoduje konieczność zaznajomienia studentów chemii z jej podstawami. Głównym celem przedmiotu Podstawy Chemii Teoretycznej jest zapoznanie studentów z fundamentami, formalizmem i metodami chemii kwantowej.

#### Literatura:

1. Włodzimierz Kołos, "Chemia kwantowa", PWN, Warszawa, 1986
2. Alojzy Gołębiowski, "Elementy mechaniki i chemii kwantowej", PWN, Warszawa, 1982
3. I.E. Irodow, "Zadania z fizyki atomowej i jądrowej", PWN, Warszawa 1974
4. Kazimierz Gumiński, Piotr Petelenz, "Elementy chemii teoretycznej", PWN, Warszawa 1989
5. Lucjan Piel, "Idee chemii kwantowej", PWN, Warszawa, 2003

Proponowana literatura przedmiotu jest dostępna w czytelni lub Bibliotece Głównej UMCS

#### Efekty uczenia się:

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:

##### WIEDZA

- W1. Zna postulaty chemii kwantowej, rozumie pojęcie funkcji falowej i operatora kwantowo-mechanicznego. K\_W08
- W2. Ma podstawową wiedzę na temat klasycznego i kwantowego opisu takich układów jak cząstka w pudle potencjału, oscylator harmoniczny, rotator sztywny. K\_W08
- W3. Potrafi zapisać równanie Schroedingera dla atomu wodoru oraz jonu wodoropodobnego i zinterpretować jego rozwiązania. K\_W08
- W4. Zna zasadę nierozróżnialności jednakowych cząstek oraz pojęcie spinu. K\_W08
- W5. Wie na czym polega przybliżenie jednoelektronowe. K\_W08
- W6. Zna przybliżone metody mechaniki kwantowej: metodę wariacyjną, metodę Ritza, Hückla oraz metodę zaburzeń. K\_W08
- W7. Zna przybliżenie Borna – Oppenheimera. K\_W08
- W8. Posiada wiedzę na temat metody Hartree–Focka oraz Hartree-Focka-Roothaana. K\_W08

##### UMIĘTNOŚCI

- U1. Powinien umieć uzasadnić konieczność wprowadzenia kwantowo-mechanicznego opisu mikroukładów i sformułować postulaty mechaniki kwantowej K\_U21
- U2. Powinien umieć normalizować funkcje falowe, obliczać komutatory wybranych operatorów i badać ich hermitowskość K\_U21
- U3. Potrafi przeprowadzać dowody określonych własności operatorów K\_U21
- U4. Potrafi obliczać średnie wartości wielkości fizycznych dla układów kwantowo-mechanicznych K\_U21
- U5. Potrafi rozwiązać równanie Schrödingera dla cząstki w pudle i wykazać efekt kwantowania energii. Dla oscylatora harmonicznego, rotatora sztywnego, atomu wodoru potrafi zinterpretować rozwiązania. K\_U21
- U6. Potrafi obliczać przybliżoną energię i funkcję falową układu w ramach metody wariacyjnej i metody Ritza K\_U21
- U7. Potrafi obliczyć pierwszą poprawkę do energii metodą perturbacyjną (zaburzeń) K\_U21
- U8. Potrafi skonstruować Hamiltonian dla dowolnej molekuly i zapisać dla niej równanie Schrodingera K\_U21
- U9. Powinien umieć dokonać analizy możliwości rozwiązania elektronowego równania Schrodingera dla układów bardziej złożonych i uzasadnić konieczność wprowadzenia kolejnych przybliżeń i stosowania przybliżonych metod chemii kwantowej K\_U21
- U10. Potrafi opisać metodę Hartree-Focka i Hartree-Focka-Roothaana oraz określić stopień złożoności obliczeń kwantowo chemicznych K\_U21
- U11. Potrafi wykorzystać wiadomości zdobyte na zajęciach z chemii kwantowej podczas zajęć z innych przedmiotów (metody spektroskopowe, chemia ogólna, nieorganiczna, organiczna, fizyczna i in.) K\_U21

##### KOMPETENCJE SPOŁECZNE

- K1. Zna ograniczenia własnej wiedzy i rozumie konieczność dalszego kształcenia K\_K01
- K2. Potrafi sformułować problem i poszukiwać jego rozwiązania samodzielnie, bądź we współpracy z nauczycielami i kolegami, pogłębiając w ten sposób swoją wiedzę. K\_K02, K\_K03

**Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS**

Godziny kontaktowe (z udziałem nauczyciela akademickiego)  
Wykład 15  
Łączna liczba godzin z udziałem nauczyciela akademickiego 15  
Liczba punktów ECTS z udziałem nauczyciela akademickiego 0,5  
Godziny niekontaktowe (praca własna studenta)  
Studiowanie literatury 5  
Przygotowanie się do sprawdzianów 10  
Łączna liczba godzin niekontaktowych 15  
Liczba punktów ECTS za godziny niekontaktowe 0,5  
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla modułu 1,0

**Sposób weryfikacji efektów kształcenia**

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:  
W1-W8 końcowe zaliczenie pisemne  
U1-U11 końcowe zaliczenie pisemne  
K1-K2 końcowe zaliczenie pisemne

**Wymagania wstępne**

Podstawy matematyki (pochodne, całki, równania różniczkowe) i fizyki.

**Punkty przedmiotu w cyklach:****<bez przypisanego programu>**

| Typ punktów                                             | Liczba | Cykl pocz. | Cykl kon. |
|---------------------------------------------------------|--------|------------|-----------|
| Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS) | 1      | 15/16      |           |