

1.	Field of study	Chemistry
2.	Academic year of entry	2018/2019 (winter term)
3.	Level of qualifications/degree	first-cycle studies
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Quantum chemistry

Module code: 0310-CH-S1-021

1. Number of the ECTS credits: 3

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
0310-CH-S1-021_1	Zna podstawowe prawa fizyki i mechaniki klasycznej sformułowane w języku matematyki wyższej.	CH_W19	4
0310-CH-S1-021_10	Umie wyjaśnić własności cząsteczek dwuatomowych na podstawie prostych modeli struktury elektronowej	CH_U19	3
0310-CH-S1-021_11	Stosuje pojęcie hybrydyzacji do wyjaśnienia struktury małych cząsteczek	CH_U16	3
0310-CH-S1-021_12	Umie wyjaśnić strukturę elektronową oraz naturę wiązań cząsteczek zawierających elektrony π	CH_U16	2
0310-CH-S1-021_13	Umie posłużyć się metodami obliczeniowymi chemii kwantowej do wyznaczania optymalnej geometrii i wybranych własności molekularnych	CH_U17	5
0310-CH-S1-021_14	Rozumie wpływ współczesnej nauki (m.in. mechaniki kwantowej) na poziom nowoczesnych technologii	CH_K03 CH_K08	2 1
0310-CH-S1-021_2	Zna podstawowe prawa mechaniki kwantowej oraz pojęcia takie jak: funkcja falowa, operator kwantowomechaniczny, postulaty mechaniki kwantowej, spin.	CH_W02 CH_W12	5 4
0310-CH-S1-021_3	Zna podstawowe metody obliczeniowe stosowane do rozwiązywania równania Schroedingera dla prostych modeli fizycznych	CH_W20	4
0310-CH-S1-021_4	Rozumie strukturę elektronową atomów w korelacji z położeniem w układzie okresowym pierwiastków	CH_W06	5
0310-CH-S1-021_5	Rozumie mechanizm tworzenia się wiązań chemicznych i zna podstawowe rodzaje wiązań	CH_W05	4

0310-CH-S1-021_6	Zna i potrafi wyjaśnić budowę elektronową małych cząsteczek z wykorzystaniem pojęcia hybrydyzacji	CH_W04	4
0310-CH-S1-021_7	Zna najważniejsze metody obliczeniowe chemii kwantowej	CH_W20	3
0310-CH-S1-021_8	Umie wyznaczyć poziomy energetyczne w prostych układach kwantowych (oscylator harmoniczny, rotator sztywny, atom wodoru, jony wodoropodobne)	CH_U18	5
0310-CH-S1-021_9	Umie wyznaczyć poziomy energetyczne atomów (termy atomowe)	CH_U16	3

3. Module description

Description	Moduł Chemia kwantowa ma za zadanie zapoznanie studentów z podstawami chemii kwantowej. W zakres przedmiotu wchodzi zatem następujące zagadnienia: przesłanki doświadczalne mechaniki kwantowej, jej aksjomatyczna konstrukcja, ścisłe rozwiązania równania Schroedingera (oscylator harmoniczny, rotator sztywny, atom wodoru, jony wodoropodobne), struktura atomów wieloelektronowych, zasady wyznaczania termów atomowych, postać równania Schroedingera dla atomów i cząsteczek wieloelektronowych, podstawowe sposoby rozwiązywania równania Schroedingera w ramach przybliżenia jednoelektronowego, podstawowe rodzaje wiązań (sigma, pi), struktura układów pi-elektronowych, najważniejsze metody obliczeniowe chemii kwantowej oraz zastosowanie chemii kwantowej do optymalizacji geometrii, określania właściwości fizykochemicznych i charakterystyki atomów oraz cząsteczek.
Prerequisites	Znajomość elementarnych pojęć matematyki wyższej (pochodnej, całki, prostych równań różniczkowych). Znajomość rachunku wektorowo-macierzowego.

4. Assessment of the learning outcomes of the module

code	type	description	learning outcomes of the module
0310-CH-S1-021_w_1	egzamin	Egzamin (pisemny lub ustny do wyboru przez studentów na pierwszym wykładzie) weryfikujący wiedzę w oparciu o treści wykładów i ćwiczeń oraz wskazaną w sylabusie literaturę	0310-CH-S1-021_1, 0310-CH-S1-021_10, 0310-CH-S1-021_11, 0310-CH-S1-021_12, 0310-CH-S1-021_13, 0310-CH-S1-021_14, 0310-CH-S1-021_2, 0310-CH-S1-021_3, 0310-CH-S1-021_4, 0310-CH-S1-021_5, 0310-CH-S1-021_6, 0310-CH-S1-021_7, 0310-CH-S1-021_8, 0310-CH-S1-021_9
0310-CH-S1-021_w_2	kolokwium	Sprawdzian pisemny weryfikujący wiedzę oraz umiejętności w rozwiązywaniu zadań i problemów z zakresu chemii kwantowej	0310-CH-S1-021_10, 0310-CH-S1-021_11, 0310-CH-S1-021_12, 0310-CH-S1-021_6, 0310-CH-

			S1-021_7, 0310-CH-S1-021_8, 0310-CH-S1-021_9
--	--	--	--

5. Forms of teaching

code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
0310-CH-S1-021_fs_1	lecture	Wykład omawiający podstawowe zagadnienia chemii kwantowej z użyciem środków audiowizualnych	15	Praca ze wskazaną literaturą przedmiotu obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy odnośnie wskazanych zagadnień na wykładzie	10	0310-CH-S1-021_w_1
0310-CH-S1-021_fs_2	laboratory classes	Ćwiczenia laboratoryjne obejmujące obliczenia kwantowochemiczne	30	Przygotowanie teoretyczne do zajęć z tematów poruszanych na wykładzie. Rozwiązywanie zagadnień podanych przez prowadzącego. Wykonanie prostych obliczeń kwantowochemicznych .	50	0310-CH-S1-021_w_2