



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	CHEMIA TEORETYCZNA, PG_00037381						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2023/2024				
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki				
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	2	Język wykładowy	polski				
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS	3.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	zaliczenie				
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Nieorganicznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr inż. Andrzej Okuniewski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	0.0	0.0	45
W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0							
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM		
	Liczba godzin pracy studenta	45	5.0	25.0	75		
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z podstawami chemii teoretycznej i mechaniki kwantowej.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K6_U05] potrafi, na podstawie zebranego materiału doświadczalnego lub źródłowego, przygotować wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną	N/A			[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania		
	[K6_W03] ma podstawową wiedzę w obszarze chemii teoretycznej, obejmującą elementy chemii kwantowej niezbędne do przewidywania struktury geometrycznej cząsteczek. Zna podstawowe narzędzia mechaniki molekularnej oraz powiązanie metod teoretycznych z dyscyplinami inżynierskimi w zakresie niezbędnym do prowadzenia podstawowych operacji technologicznych	rozumie oraz umie posługiwać się terminologią oraz oznaczeniami stosowanymi w chemii teoretycznej, zna historię oraz nowoczesne idee w zakresie chemii kwantowej, analizuje kwantowo-mechaniczne problemy modelowe i potrafi jakościowo dyskutować ich zastosowania w chemii, jest przygotowany do kontynuowania nauki metod teoretycznych w chemii			[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
[K6_W05] zna i rozumie procesy chemiczne i algorytmy rozwiązań modeli matematycznych niezbędnych do projektowania procesów technologicznych, współzależności struktury chemicznej współcześnie stosowanych materiałów i ich właściwości, umożliwiającą dobór materiałów w technologiach zrównoważonego rozwoju, materiało- i energooszczędnych	wykorzystuje oprogramowanie komputerowe do wyznaczania wybranych własności atomów, interpretuje otrzymane wyniki i konfrontuje je z literaturowymi wynikami doświadczalnymi			[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym			

Treści przedmiotu	<p>Wykład: Podstawowe pojęcia. Historia mechaniki kwantowej. Dualizm korpuskularno-falowy. Postulaty mechaniki kwantowej. Nieoznaczoność. Funkcje wielu zmiennych. Równania różniczkowe. Cząstka w jednowymiarowej studni potencjału. Zjawisko tunelowe. Oscylator harmoniczny. Cząstka na okręgu. Cząstka w dwuwymiarowej studni potencjału. Rotator sztywny. Atom wodoru i jony wodoropodobne. Układy wieloelektronowe.</p> <p>Laboratoria komputerowe: Sprawdzenie słuszności reguł zabudowy powłok elektronowych. Wyznaczanie energii wzbudzeń elektronowych. Wyznaczanie energii jonizacji. Wyznaczanie elektroujemności Mullikena i twardości Pearsona. Badanie zmienności elektroujemności oraz twardości w układzie okresowym. Ładunek jądra i jego ekranowanie.</p> <p>Szczegółowy program wykładu oraz tematyka laboratorium są na bieżąco aktualizowane i zamieszczane na stronie Katedry Chemii Nieorganicznej: chem.pg.edu.pl/kchn/ch-chemia-teoretyczna</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student musi mieć opanowane następujące przedmioty na poziomie studiów pierwszego stopnia: matematyka, fizyka, chemia ogólna, chemia fizyczna.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Kolokwium zaliczeniowe	60.0%	50.0%
	Laboratoria komputerowe	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur		D. O. Hayward: Mechanika kwantowa dla chemików, <i>PWN</i> , Warszawa 2007.
	Uzupełniająca lista lektur		<p>R. F. Nalewajski: Podstawy i metody chemii kwantowej, <i>PWN</i>, Warszawa 2001.</p> <p>L. Piel: Idee chemii kwantowej. <i>PWN</i>, Warszawa 2011.</p> <p>W. Kołos, J. Sadlej: Atom i cząsteczka, <i>WNT</i>, Warszawa 1998.</p> <p>H. Haken, H. Ch. Wolf: Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej, <i>PWN</i>, Warszawa 1998.</p>
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	chem.pg.edu.pl/kchn/ch-chemia-teoretyczna		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		