

## KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: <b>CHEMIA KWANTOWA</b>		2. punkty ECTS
		<b>3</b>
		3. kod ECTS
		<b>S/N2CHEMII-O-ChemKWANT-I</b>
4. Kierunek studiów: <b>CHEMIA</b>		5. Ścieżka kształcenia: -
6. Semestr studiów: <b>I</b>		7. Stopień: <b>studia II stopnia</b>
8. Forma studiów: <b>studia stacjonarne/niestacjonarne</b>		9. Język wykładowy: <b>polski</b>
10. Status modułu: <b>obowiązkowy</b>		11. Sposób zaliczenia: <b>zaliczenie</b>
12. Grupa: <b>moduł obligatoryjny z zakresu kształcenia podstawowego</b>		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
<b>wykład</b>	<b>wykład z prezentacją multimedialną/ wykład konwersatoryjny</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>
<b>ćwiczenia audytoryjne</b>	<b>ćwiczenia audytoryjne: analiza przypadków/ dyskusja/ rozwiązywanie zadań</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>
16. Cele i zadania modułu: 1. <b>Przekazanie studentom wiedzy z zakresu metod obliczeniowych właściwych dla chemii kwantowej oraz ich zastosowania w rozwiązywaniu złożonych problemów badawczych. Ponadto przygotowanie studentów do właściwej interpretacji wyników badań eksperymentalnych.</b>		
17. Wymagania formalne: 1. <b>Obecność na zajęciach organizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych.</b>		
18. Wymagania wstępne: 1. <b>Usystematyzowana wiedza matematyczna.</b>		
19. Treści programowe:		
lp.	<b>W - wykład / C - ćwiczenia:</b>	
<b>W1/ C1</b>	Wprowadzenie do modułu: elementarne prawa i pojęcia właściwe dla chemii kwantowej. Postulaty mechaniki kwantowej.	
<b>W2/ C2</b>	Dualizm korpuskularno-falowy. Zasada nieoznaczoności Heisenberga.	
<b>W3/ C3</b>	Pojęcie i własności operatora. Przykład operatorów. Działania na operatorach.	
<b>W4/ C4</b>	Rozwiązanie równania Schrödingera dla: cząstki swobodnej, cząstki wobec bariery potencjału, oscylatora harmonicznego, rotatora sztywnego, atomu wodoru. Analiza i wizualizacja rozwiązań równania Schrödingera. Obliczenia kwantowe.	
<b>W5/ C5</b>	Radialna gęstość prawdopodobieństwa.	
<b>W6/ C6</b>	Atomy wieloelektronowe. Zakaz Pauliego. Obliczenia teoretyczne.	
<b>W7/ C7</b>	Zasada wariacyjna i metoda wariacyjna.	
<b>W8/ C8</b>	Charakterystyka i podział metod obliczeniowych chemii kwantowej.	
<b>W9/ CW9</b>	Obliczanie parametrów molekularnych i struktury elektronowej molekuł.	

W10/ C10	Zastosowanie chemii kwantowej.				
20. Zakładane efekty uczenia się:					
Wiedza: zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej					
Nr efektu	Efekt uczenia się - WIEDZA				
	Student, który zaliczył moduł:				
01	zna i opisuje postulaty mechaniki kwantowej.				
02	zna elementarne metody obliczeniowe chemii kwantowej.				
Umiejętności: zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej					
Nr efektu	Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI				
	Student, który zaliczył moduł:				
03	potrafi wykonać obliczenia właściwe dla zakresu chemii kwantowej oraz prawidłowo interpretować uzyskane wyniki.				
04	potrafi posługiwać się pojęciami właściwymi dla chemii kwantowej.				
Kompetencje społeczne: zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania					
Nr efektu	Efekt uczenia się - KOMPETENCJE				
	Student, który zaliczył moduł:				
05	jest świadomy własnych ograniczeń i rozumie potrzebę ustawicznego pogłębiania swojej wiedzy.				
06	potrafi samodzielnie sformułować problem i poszukiwać jego rozwiązania samodzielnie, bądź we współpracy z grupą.				
20a. Odniesienie modułowych efektów uczenia się do kierunkowych efektów uczenia się:					
Nr efektu modułowego		Symbol EKK			
01		KK2P_W01			
02		KK2P_W01			
03		KK2P_U07			
04		KK2P_U02			
05		KK2P_K01			
06		KK2P_K04			
21. Sposoby oceny:					
F – formująca: F3-sprawdzian		P – podsumowująca: P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru P4-zaliczenie na ocenę			
22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:					
Nr efektu	Treści programowe		Sposób oceny		
01	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
02	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
03	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
04	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
05	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
06	W1-W10, C1-C10		F3, P3, P4		
23. Warunek zaliczenia modułu:					
Ocenę z zaliczenia stanowi średnią ocen zdobytych w czasie semestru, w tym za: sprawdziany śródsesemestralne [dotyczy ćwiczeń audytoryjnych] i zaliczenie końcowe na ocenę [dotyczy wykładów]. Obowiązująca skala ocen to:					
Dostateczny		Dostateczny plus	Dobry	Dobry plus	Bardzo dobry
50-59%		60-69%	70-79%	80-89%	90-100%
24. Całkowity nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów uczenia się w godzinach oraz punktach ECTS:					
Ogółem stacjonarne		Ogółem niestacjonarne		stacjonarne	niestacjonarne
75 h		75 h		3 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego				1,6 ECTS	0,8 ECTS

- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy	1,4 ECTS	2,2 ECTS
25. Wykaz <b>literatury podstawowej</b> ( <i>wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta</i> )		
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Kołos W., Chemia kwantowa, Warszawa 1978.</li> <li>2. Gołębiowski A., Elementy mechaniki i chemii kwantowej, Warszawa 1984.</li> <li>3. Hayward D., Mechanika kwantowa dla chemików, Warszawa, 2007.</li> <li>4. Kołos W., Sadlej J., Atom i cząsteczka, Warszawa 2016 (wyd.2).</li> <li>5. Pielą L., Idee chemii kwantowej, Warszawa 2021.</li> </ol>		
26. Wykaz <b>literatury uzupełniającej</b> :		
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Baggott J., Teoria kwantowa. Odkrycia, które zmieniły świat, Warszawa 2013.</li> <li>2. Lederman M., Hill C., Zrozumieć niepojęte. Fizyka kwantowa i rzeczywistość, Warszawa 2013.</li> </ol>		