

WYDZIAŁ CHEMICZNY					
KARTA PRZEDMIOTU					
Nazwa przedmiotu w języku polskim			Theoretical Chemistry		
Nazwa przedmiotu w języku angielskim			Chemia Teoretyczna		
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):			Chemia		
Specjalność (jeśli dotyczy):					
Poziom i forma studiów:			II stopień, stacjonarna		
Rodzaj przedmiotu:			obowiązkowy		
Kod przedmiotu			CHC023014		
Grupa kursów			NIE		
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	30	15	30		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	120	60	60		
Forma zaliczenia	Egzamin	zaliczenie na ocenę	zaliczenie na ocenę		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS	4	2	2		
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)		2	2		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)	1	0,5	1		
WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH					
1. Chemia ogólna, Fizyka I i II 2. Algebra, Analiza matematyczna 3. Chemia fizyczna, Podstawy chemii kwantowej					
C1 Zapoznanie studentów z teorią budowy atomu i cząsteczki. Uzyskanie umiejętności przewidywania struktury układów molekularnych stosując metody chemii kwantowej. Teoretyczna interpretacja właściwości termodynamicznych i elektronowych układów molekularnych. Nauczenie wykonywania podstaw modelowania molekularnego.					
PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ					
Z zakresu wiedzy: Osoba, która zaliczyła przedmiot: PEK_W01 – rozumie problemy i niedostatki fizyki klasycznej w opisie mikroskopowym, PEK_W02 – zna postulaty mechaniki kwantowej i elementy rachunku operatorowego. PEK_W03 – potrafi zapisać równanie Schrödingera (RS) dla wybranych problemów fizycznych oraz dla dowolnego układu molekularnego, PEK_W04 – zna rozwiązanie RS dla atomu wodoru i interpretację tych rozwiązań, PEK_W05 – rozumie budowę elektronową atomów, PEK_W06 – zna podstawy teorii orbitali molekularnych, PEK_W07 – zna teorię hybrydyzacji, teorię mezomerii oraz pojęcie wiązania wielocentrowego PEK_W08 – ma podstawową wiedzę o rozwiązaniach równań Hartree-Focka i znaczenie energii korelacji. PEK_W09 – rozumie teorię oddziaływań molekularnych.					
Z zakresu umiejętności: Osoba, która zaliczyła przedmiot: PEK_U01 – potrafi praktycznie stosować informacje o konfiguracji elektronowej atomów,					

PEK_U02 – umie interpretować widma elektronowe atomu wodoru i atomów ciężkich,
PEK_U03 – umie przewidywać strukturę cząsteczek organicznych i nieorganicznych,
PEK_U04 – potrafi interpretować wyniki spektroskopowe w oparciu o obliczenia kwantowo-chemiczne,
PEK_U05 – potrafi badać mechanizmy reakcji chemicznych.

Z zakresu kompetencji społecznych:

Osoba, która zaliczyła przedmiot:

PEK_K01 – rozumie potrzebę systematycznego uzupełniania wiedzy

TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć - wykład		Liczba godzin
Wy1	Mechanika klasyczna i kwantowa. Podstawy matematyczne rachunku prawdopodobieństwa. Doświadczalne podstawy dualizmu korpuskularno-falowego. Powstanie teorii kwantów z elementami teorii Bohra i przyczyny jej niepowodzenia.	2
Wy2	Podstawy mechaniki kwantowej. Postulaty mechaniki kwantowej. Definicja funkcji falowej i jej probabilistyczna interpretacja. Definicja operatorów odpowiadających wielkościom mierzalnym.	2
Wy3	Podstawy mechaniki kwantowej II. Równanie Schrödingera. Wartości i funkcje własne równania Schrödingera. Wartości średnie wielkości mierzalnych. Właściwości funkcji własnych równania Schrödingera nie zawierającego czasu.	2
Wy4	Atom wodoru. Równanie Schrödingera dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych. Rozwiązania równania ze względu na energię i funkcje. Reprezentacje orbitali atomowych. Geometryczne właściwości orbitali wodoropodobnych. Liczby kwantowe atomu	2
Wy5	Zakaz Pauliego. Spin. Multipletowość układu wieloelektronowego. Stany elektronowe atomów (termy atomowe). Nerozróżnialność cząstek. Fermiony i bozony. Pojęcie spinorbitalu. Zakaz Pauliego. Wyznacznik Slatera. Pojęcie konfiguracji elektronowej. Koncepcja układu okresowego pierwiastków. Reguły Hundta.	2
Wy6	Atom wieloelektronowy. Hamiltonian i równanie Schrödingera dla atomu wieloelektronowego. Wyznaczniki Slatera. Funkcje falowe dla atomów wieloelektronowych. Przybliżenie jednoelektronowe – spinorbitale i orbitale. Zakaz Pauliego jako wymaganie antysymetryczności funkcji.	2
Wy7	Równania Hartree-Focka. Wyrażenie na energię w przybliżeniu jednoelektronowym. Wyprowadzenie równań Hartree-Focka. Całki jedno i dwuelektronowe. Energia wymiany. Pojęcie otwarto- i zamkniętopowłokowej konfiguracji elektronowej. Reguły wyboru dla elektronowych przejść optycznych. Korelacja elektronowa	2
Wy8	Cząsteczka. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Równanie Schrödingera dla cząsteczek. Teoria orbitali molekularnych. Przybliżenie LCAO. Równania Hartree-Focka-Roothaana-Halla. Baza funkcji orbitali atomowych. Funkcje gaussowskie i slaterowskie.	2
Wy9	Wiązania chemiczne. Elektrostatyczny and kowalencyjny charakter wiązań chemicznych. Rodzaje wiązań. Orbitale σ i π , orbitale wiążące i antywiążące, ich względne energie i kształty (reprezentacja graficzna). Struktura elektronowa cząsteczek dwuatomowych, rząd wiązania.	2
Wy10	Koncepcja orbitali zlokalizowanych. Hybrydyzacja typu sp^3 , sp^2 i sp . Reprezentacja gęstości elektronowej atomów w cząsteczkach. Orbitale zlokalizowane jako element metody przewidywania struktury cząsteczek. Struktura związków biologicznych zawierających fosfor. Mezomeria. Wiązania chemiczne wielocentrowe.	2
Wy11	Spektroskopia molekularna I. Rozdzielenie rotacji i oscylacji. Widmo rotacyjne cząsteczek dwuatomowych i elementy spektroskopii mikrofalowej. Reguły wyboru.	2
Wy12	Spektroskopia molekularna II. Widmo oscylacyjne cząsteczek dwuatomowych i wieloatomowych. Widma w podczerwieni i widma Ramana. Intensywności widm. Reguły wyboru.	2
Wy13	Właściwości cząsteczek oparte na energii. Energie jonizacji i powinowactwo	2

	elektronowe. Energetyka reakcji chemicznych. Spektroskopia masowa. Koncepcja stanu przejściowego w reakcji chemicznej. Mechanizmy reakcji.	
Wy14	Właściwości cząsteczek oparte na funkcji falowej. Gęstość elektronowa w cząsteczce. Rząd wiązania chemicznego. Rozkład ładunku w cząsteczce. Momenty dipolowe i wyższe w układach molekularnych.	2
Wy15	Oddziaływania molekularne. Teoria oddziaływań molekularnych. Oddziaływania elektrostatyczne, wymienne, indukcyjne, dyspersyjne. Kompleksy z przeniesieniem ładunku. Wiązanie wodorowe. Struktura drugorzędowa układów molekularnych, analiza konformacyjna.	2
	Suma godzin	30
Forma zajęć - ćwiczenia		Liczba godzin
Ćw1	Sposób prowadzenia i zaliczenia ćwiczeń. Problemy interpretacyjne mechaniki klasycznej i narodziny teorii kwantowych	2
Ćw2	Rachunek operatorowy. Badanie właściwości operatorów. Zapisywanie równania Schrödingera.	2
Ćw3	Rozwiązanie prostych zagadnień kwantowo-mechanicznych: studnia potencjału i cząstka w pudle. Zastosowania tych modeli do problemów chemicznych. Rotator i oscylator – klasyczny i kwantowy. Elementy spektroskopii.	2
Ćw4	Orbitale wodoropodobne. Właściwości przestrzenne orbitali s, p i d. Transformacja orbitali pomiędzy reprezentacjami. Obrazy części radialnych i kątowych. Badanie antysymetryczności funkcji.	2
Ćw5	Badanie energetycznych i elektronowych właściwości cząsteczek.	2
Ćw6	Badanie energetycznych i elektronowych właściwości cząsteczek.	2
Ćw7	Obliczenia energii oddziaływań molekularnych. Rozkład ładunków, moment dipolowy i polaryzowalność.	2
Ćw8		1
	Suma godzin	15
Forma zajęć - laboratorium		Liczba godzin
La1	Organizacja laboratorium komputerowego i centrum obliczeniowego. Dystrybucja kont i podstawowe informacje o systemach.	2
La2	Elementy systemu UNIX (komendy).	2
La3	Elementy systemu UNIX (edytory).	2
La4	Struktura programu Gaussian-90, system kolejkowy,	2
La5	Konstrukcja geometrii cząsteczek – Macierz-Z.	2
La6	Obliczenia Hartree-Focka, struktura pliku wynikowego.	2
La7	Program graficzny – Molden.	2
La8	Optymalizacji struktury cząsteczki.	2
La9	Częstości, funkcje termodynamiczne i widma wibracyjne.	2
La10	Projekt I – struktura i właściwości termodynamiczne cząsteczki.	2
La11	Energetyka reakcji chemicznej.	2
La12	Projekt II – obliczenia częstości cząsteczki, symulacja widm IR.	2
La13	Ciepło reakcji, energia tworzenia, rozkład ładunków.	2
La14	Projekt III – mechanizm reakcji.	2
La15	Stan przejściowy, oddziaływania molekularne.	2
	Suma godzin	30
STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE		
N1. Prezentacja multimedialna N2. Wykonywanie zadań w laboratorium N3. Rozwiązanie zadań N5. Komputer / program komputerowy /modelowanie		

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ		
Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
P	PEK_W01 – PEK_W09	Egzamin końcowy
F1 (ćwiczenia)	PEK_U01 –PEK_U03	Kolokwium elektroniczne
F3 (laboratorium)	PEK_U01 –PEK_U04	Wykonanie zadań i projektów
LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA		
<p><u>LITERATURA PODSTAWOWA:</u> [1] M. A. Ratner, G. C. Schatz, Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry. Prentice Hall, Upper Saddle River, 2001. [2] L. Piel, Ideas of Quantum Mechanics [3] Gaussian-90 electronic manual</p> <p><u>LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:</u> [1] Quantum Mechanics for Chemists, D. O. Hayward, PWN, Warszawa, 2007. [2] P. W. Atkins, Physical Chemistry, PWN Warszawa, 2003</p>		
OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)		
Szczepan Roszak, Szczepan.roszak@pwr.edu.pl		