

WYDZIAŁ CHEMICZNY					
KARTA PRZEDMIOTU					
Nazwa przedmiotu w języku polskim	Modele matematyczne i metody symulacji w chemii teoretycznej				
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	Mathematical models and simulation approaches in theoretical chemistry				
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):	Chemia i analityka chemiczna				
Specjalność (jeśli dotyczy):					
Poziom i forma studiów:	I stopień, stacjonarna				
Rodzaj przedmiotu:	obowiązkowy				
Kod przedmiotu	CHC015010				
Grupa kursów	NIE				
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	30	30			
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	90	60			
Forma zaliczenia	Egzamin	zaliczenie na ocenę			
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS	3	2			
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)		2			
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)	1	1			
WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH					
1. Chemia ogólna, Fizyka I i II					
2. Algebra, Analiza matematyczna					
C1. Zapoznanie studentów z podstawami modelowania matematycznego.					
C2. Uzyskanie umiejętności przewidywania struktury układów molekularnych.					
C3. Teoretyczna interpretacja właściwości układów molekularnych.					
C4. Nauczenie wykonywania prostego modelowania molekularnego.					
PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ					
Z zakresu wiedzy:					
Osoba, która zaliczyła przedmiot:					
PEK_W01 – rozumie problemy modelowania matematycznego,					
PEK_W02 – rozumie znaczenie funkcji falowej, i potrafi ją interpretować,					
PEK_W03 – potrafi zapisać równanie Schrödingera (RS) dla dowolnego układu molekularnego,					
PEK_W04 – zna podstawy rozwiązania RS dla atomu wodoru,					
PEK_W05 – rozumie pojęcie konfiguracji elektronowej atomu,					
PEK_W06 – zna podstawy teorii orbitali molekularnych,					
PEK_W07 – zna koncepcję oktetu elektronowego oraz teorię hybrydyzacji,					
PEK_W08 – ma podstawową wiedzę o właściwościach elektronowych układów molekularnych.					
Z zakresu umiejętności:					
Osoba, która zaliczyła przedmiot:					
PEK_U01 – potrafi praktycznie posługiwać się układem okresowym pierwiastków,					

PEK_U02 – umie interpretować widma elektronowe atomu wodoru i atomów ciężkich, PEK_U03 – umie przewidywać strukturę cząsteczek organicznych, PEK_U04 – potrafi interpretować niektóre wyniki spektroskopowe w oparciu o modelowanie molekularne PEK_U05 – potrafi wyznaczyć niektóre właściwości elektronowe i termodynamiczne cząsteczek.		
TREŚCI PROGRAMOWE		
Forma zajęć - wykład		Liczba godzin
Wy1	<b>Modelowanie matematyczne.</b> Atomistyczna struktura materii. Opis cząsteczek i procesów za pomocą mechaniki molekularnej. Pola siłowe	2
Wy2	<b>Podstawy mechaniki kwantowej.</b> Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Koncepcja funkcji falowej, jej właściwości i interpretacja statystyczna. Równanie Schrödingera. Równania różniczkowe, ich rozwiązania i interpretacje.	2
Wy3	<b>Atom wodoru.</b> Przybliżone równanie Schrödingera dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych. Rozwiązania równania ze względu na energię i orbitale. Geometryczne właściwości orbitali wodoropodobnych. Liczby kwantowe atomu wodoru. Poziomy energii i widmo emisyjne atomu wodoru.	2
Wy4	<b>Atom wodoru.</b> 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	<b>Atom wieloelektronowy.</b> Równanie Schrödingera dla atomu wieloelektronowego. Funkcja falowa w postaci iloczynu (Hartree) i w postaci wyznacznika Slatera. Funkcje falowe dla atomów wieloelektronowych. Koncepcja spinorbitalu i orbitalu w atomie wieloelektronowym. Zakaz Pauliego jako wymaganie antysymetryczności funkcji. Stan elektronowy atomu.	2
Wy6	<b>Równania Hartree-Focka.</b> Wyrażenie na energię atomu dla wyznacznika Slatera. Sformułowanie równań Hartree-Focka. Całki jedno i dwuelektronowe. Energia wymienna. Pojęcie otwarte- i zamkniętopowłokowej konfiguracji elektronowej. Reguły wyboru dla przejść optycznych.	2
Wy7	<b>Cząsteczka.</b> Rozdzielenie ruchu jąder i elektronów w cząsteczkach. Przybliżenie Born-Oppenheimera. Równanie Schrödingera dla cząsteczek. Funkcja falowa dla cząsteczek. Teoria orbitali molekularnych. Koncepcja funkcji jako liniowej kombinacji orbitali atomowych. Równania Hartree-Focka-Roothaana-Halla. Baza funkcji orbitali atomowych. Funkcje gaussowskie i slaterowskie.	2
Wy8	<b>Wiązania chemiczne.</b> Elektrostatyczny charakter wiązań chemicznych. Rodzaje wiązań: jonowe, kowalencyjne, metaliczne i oddziaływanie międzycząsteczkowe. Zarys Teorii Orbitali Molekularnych (LCAO) – orbitale $\sigma$ i $\pi$ , orbitale wiążące i antywiążące, ich względne energie i kształty (reprezentacja graficzna). Struktura elektronowa cząsteczek dwuatomowych, rząd wiązania.	2
Wy9	<b>Koncepcja orbitali zhybrydyzowanych I.</b> Hybrydyzacja typu $sp^3$ . Reprezentacja gęstości elektronowej atomów w cząsteczkach. Orbitale zlokalizowane jako element metody przewidywania struktury cząsteczek. Struktura cząsteczek posiadających wiązania pojedyncze: $H_2O$ , $NH_3$ i $CH_4$ oraz ich pochodne. Izomery i konformery. Właściwości wiązania $\sigma$ .	2
Wy10	<b>Koncepcja orbitali zhybrydyzowanych II.</b> Hybrydyzacja $sp^2$ i $sp$ . Przewidywanie struktury cząsteczek z podwójnym i potrójnym wiązaniem chemicznym. Właściwości wiązania typu $\pi$ . Struktury mezomeryczne. Wiązanie koordynacyjne. Struktura związków biologicznych zawierających fosfor.	2
Wy11	<b>Podstawy spektroskopii molekularnej I.</b> Rozdzielenie rotacji i oscylacji. Widmo rotacyjne cząsteczek dwuatomowych i elementy spektroskopii mikrofalowej.	2
Wy12	<b>Podstawy spektroskopii molekularnej II.</b> Widmo oscylacyjne cząsteczek dwuatomowych i wieloatomowych. Widma w podczerwieni i widma Ramana.	2
Wy13	<b>Właściwości cząsteczek oparte na energii.</b> Energie jonizacji i powinowactwa	2

	elektronowego. Energetyka reakcji chemicznych. Spektroskopia masowa. Koncepcja stanu przejściowego w reakcji chemicznej.	
Wy14	<b>Właściwości cząsteczek oparte na funkcji falowej.</b> Gęstość elektronowa w cząsteczce. Rząd wiązania chemicznego. Rozkład ładunku w cząsteczce. Momenty dipolowe i wyższe w układach molekularnych.	2
Wy15	<b>Oddziaływania molekularne.</b> Koncepcja oddziaływań Oddziaływania elektrostatyczne, wymienne, indukcyjne, dyspersyjne. Kompleksy z przeniesieniem ładunku. Wiązanie wodorowe. Struktura drugorzędowa układów molekularnych, analiza konformacyjna.	2
	Suma godzin	<b>30</b>
<b>Forma zajęć - ćwiczenia</b>		<b>Liczba godzin</b>
Ćw1	Sposób prowadzenia i zaliczenia ćwiczeń. Problemy interpretacyjne mechaniki klasycznej i narodziny teorii kwantowych. Podstawy mechaniki molekularnej	2
Ćw2	Hipoteza de Broglie'a. Badanie struktury atomu wodoru w oparciu o model atomu Bohra.	2
Ćw3	Rozwiązywanie prostych zagadnień kwantowo-mechanicznych: studnia potencjału i cząstka w pudle. Zastosowania tych modeli do problemów chemicznych..	2
Ćw4	Rotator i oscylator – klasyczny i kwantowy. Elementy spektroskopii.	2
Ćw5	Funkcja falowa – badania właściwości. Normalizacja funkcji.	2
Ćw6	Orbitale wodoropodobne. Właściwości przestrzenne orbitali s, p i d. Transformacja orbitali pomiędzy reprezentacjami. Obrazy części radialnych i kątowych. Badanie antysymetryczności funkcji.	2
Ćw7	Model kationu $H_2^+$ oraz cząsteczek dwuatomowych. Klasyfikacja orbitali molekularnych.	2
Ćw8	Wiązania $\sigma$ i $\pi$ w cząsteczkach. Budowa elektronowa cząsteczek.	2
Ćw9	Powtórzenie materiału i <b>I kolokwium.</b>	2
Ćw10	Model hybrydyzacji orbitali I. Przewidywanie struktury cząsteczek.	2
Ćw11	Model hybrydyzacji orbitali II. Przewidywanie struktury cząsteczek.	2
Ćw12	Model hybrydyzacji orbitali II. Przewidywanie struktury cząsteczek.	2
Ćw13	Badania właściwości elektronowych cząsteczek.	2
Ćw14	Badania właściwości elektronowych cząsteczek.	2
Ćw15	Badania właściwości elektronowych cząsteczek. II	2
	Suma godzin	30
<b>STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE</b>		
N1. Prezentacja multimedialna N2. Wykonywanie zadań w laboratorium N3. Rozwiązywanie zadań N5. Komputer / program komputerowy /modelowanie		
<b>OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ</b>		
<b>Oceny</b> (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
W	PEK_W01 – PEK_W09	Egzamin końcowy
F1 (ćwiczenia)	PEK_U01 –PEK_U03	elektroniczne kolokwium cząstkowe I (maks. 10 pkt.)
F2 (ćwiczenia)	PEK_U03 –PEK_U05	elektroniczne kolokwium cząstkowe II (maks. 14 pkt.)
P (ćwiczenia) = 3,0 jeżeli (F1 + F2) = 12,0 – 14,5 pkt. 3,5 jeżeli (F1 + F2) = 15,0 – 17,5 pkt.		

4,0 jeżeli  $(F1 + F2) = 18,0 - 20,0$  pkt.  
4,5 jeżeli  $(F1 + F2) = 20,5 - 22,0$  pkt.  
5,0 jeżeli  $(F1 + F2) = 22,5 - 23,5$  pkt.  
5,5 jeżeli  $(F1 + F2) = 24,0$  pkt.

**LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA**

**LITERATURA PODSTAWOWA:**

- [1] W. Kolos, J. Sadlej, Atom i Cząsteczka, WNT, Warszawa, 1998.
- [2] Mechanika Kwantowa dla Chemików, D. O. Hayward, PWN, Warszawa, 2007.

**LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:**

- [1] L. Piela, Idee Chemii Kwantowej, PWN, Warszawa, 2010.
- [2] W. Kołos, Chemia Kwantowa, PWN, Warszawa, 1975.
- [3] K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia Fizyczna (cz. 2), PWN, Warszawa, 2005.
- [4] System elektronicznych korepetycji (e – learning).

**OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)**

**Szczepan Roszak, [Szczepan.roszak@pwr.edu.pl](mailto:Szczepan.roszak@pwr.edu.pl)**