

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Podstawy chemii teoretycznej	
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013	
Specjalność:	analityka chemiczna	
Rok/Semestr:	II/4	
Liczba godzin:	30,0	
Nauczyciel:	Woliński Krzysztof, prof. dr hab.	
Forma zajęć:	wykład	
Rodzaj zaliczenia:	egzamin	
Punkty ECTS:	6,0	
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łączna liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu	
Wstępne wymagania:	Podstawowe wiadomości z zakresu analizy matematycznej	
Metody dydaktyczne:	• konsultacje • objaśnienie lub wyjaśnienie • wykład konwersatoryjny • z użyciem komputera	
Zakres tematów:	1. Pojęcie operatora. Operatory liniowe i hermitowskie, równanie własne operatora; własności operatorów - dowody 2. Postulaty mechaniki kwantowej 3. Postulat I – koncepcja funkcji falowej 4. Postulat II – reguły tworzenia operatorów 5. Postulat III – równanie Schrödingera z czasem 6. Postulat IV – wyniki pomiarów zmiennych dynamicznych 7. Postulat V – wartości oczekiwane 8. Proste zastosowania mechaniki kwantowej: cząstka w pudle potencjału, efekt tunelowy, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, atom wodoru oraz jony wodoropodobne 9. Wielocząstkowa funkcja falowa; pojęcie spinu, zasada nierozróżnialności jednakowych cząstek (symetria wielocząstkowej funkcji falowej, fermiony, bozony) 10. Przybliżone metody mechaniki kwantowej: metoda wariacyjna, metoda Ritza, metoda Hückla, metoda perturbacyjna (zaburzeń) 11. Przybliżenie jednoelektronowe: układy dwu- oraz wieloelektronowe; orbital, spinorbital, wyznacznikowa funkcja falowa Slaterra 12. Atomy wieloelektronowe: orbitale atomowe, konfiguracje elektronowe atomów 13. Metoda Hartree–Focka oraz Hartree-Focka-Roothaana. Metoda iteracyjna rozwiązywania równań Hartree–Focka 14. Cząsteczki: rozdzielenie ruchu jąder i elektronów w cząsteczkach – przybliżenie Borna – Oppenheimera; orbitale molekularne i struktura elektronowa cząsteczek	
Forma oceniania:	• egzamin pisemny	
Literatura:	1. Włodzimierz Kołos, "Chemia kwantowa", PWN , Warszawa, 1986 2. Alojzy Gołębiewski, "Elementy mechaniki i chemii kwantowej", PWN , Warszawa, 1982 3. I.E. Irodow, "Zadania z fizyki atomowej i jądrowej", PWN, Warszawa 1974 4. Kazimierz Gumiński, Piotr Petelenz, "Elementy chemii teoretycznej", PWN , Warszawa 1989	