Nazwa przedmiotu
Chemia kwantowa cząsteczek i makrocząsteczek

Kod ECTS
6.5-CKCM

Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot
Wydział Chemii/ Zakład Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego

Studia

kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja
Biologia	*I (licencjat)*	*stacjonarne*	*Biologia eksperymentalna*	

Nazwisko osoby prowadzącej
dr hab. Małgorzata Broda

Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin

A. Formy zajęć
- *wykład, (W)*
- *laboratorium (L)*

B. Sposób realizacji
- *zajęcia w sali dydaktycznej*

C. Liczba godzin
15W, 30L

Liczba punktów ECTS 3

Godziny kontaktowe
- udział w wykładach: 15 x 1h = 15h
- udział w laboratoriach: 15 x 2h = 30h
- konsultacje 1h

Razem 46h = 2 p. ECTS

Praca własna studenta
- przygotowanie do laboratoriów 15h
- przygotowanie do egzaminu na ocenę 15h

Razem 30h = 1 p. ECTS

W (1p. ECTS) + L (2 p. ECST)

Status przedmiotu
- *do wyboru*

Język wykładowy
polski

Metody dydaktyczne
- *wykład z prezentacją multimedialną*
- *laboratorium: rozwiązywanie problemów obliczeniowych; prezentacje przygotowane przez studentów*

Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne

- **Sposób zaliczenia**
- *wykład: egzamin pisemny*
- *laboratorium: zaliczenie z oceną*

B. Formy zaliczenia
- *egzamin pisemny*
- *laboratorium: ustalenie oceny zaliczeniowej w oparciu o oceny cząstkowe otrzymywane w trakcie semestru na podstawie aktywnego uczestnictwa w dyskusji*

C. Podstawowe kryteria
wykład: do zdania egzaminu konieczne jest udzielenie poprawnych odpowiedzi na co najmniej 50% zadanych pytań
laboratorium: ocenę zaliczeniowa ustala się na podstawie ocen cząstkowych

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. *Wymagania formalne: brak wymagań wstępnych*
B. *Wymagania wstępne: brak wymagań wstępnych*

Cele przedmiotu
Celem przedmiotu jest zapoznanie studenta z podstawami mechaniki kwantowej oraz jej zastosowań zarówno w układach prostych, jak i tych bardziej złożonych, o realnym znaczeniu w biologii i biochemii

Treści programowe

A. *Problematyka wykładu:* Doświadczalne podstawy teorii kwantów. Promieniowanie ciała doskonale czarnego. Efekt fotoelektryczny. Widmo emisyjne atomu wodoru. Model atomu Bohr'a. Hipoteza de Broglie'a. Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Funkcja falowa. Operatory. Równania Schrodingera . Cząstka w studni potencjału. Oscylator harmoniczny. Bariera potencjału. Efekt tunelowy. Postulaty mechaniki kwantowej. Atom wodoru. Spin. Przybliżone metody chemii kwantowej. Atomy wieloelektronowe. Konfiguracja elektronowa. Przybliżenie jednoelektronowe. Metoda Hartree-Focka. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Metoda LCAO MO. Wiązanie chemiczne, hybrydyzacja. Zastosowania teorii grup. Symetria cząsteczek. Podstawy spektroskopii molekularnej. Metody obliczeniowe chemii kwantowej: półemipiryczne i *ab initio*.

B. *Problematyka konwersatorium :* rozwiązywanie zadań związanych z treściami wykładu

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

1. Kołos W., Sadlej J., Atom i cząsteczka, WNT, Warszawa 1998.
2. Kołos W., Chemia kwantowa, PWN Warszawa 1986.
3. Hayward D.O. Mechanika kwantowa dla chemików, PWN. Warszawa 2007

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

jw.

B. Literatura uzupełniająca

1. *Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN Warszawa 2003.*
2. *Atkins P. W., Molekularna mechanika kwantowa*
3. *Grodzicki A., Symetria cząsteczek a ich widma oscylacyjne, PWN, Warszawa 1988.*
4. *Haken H., Wolf H. C., Atomy i kwanty. Wprowadzenie do współczesnej spektroskopii atomowej., PWN Warszawa 2002.*

Efekty kształcenia

Wiedza

K_W03 zna podstawy metod służących do opisu prostych układów kwantowych OP1A _W01

K_W05 definiuje podstawowe pojęcia chemii kwantowej OP1A _W02

Umiejętności

K_U04 Potrafi wykorzystywać poznane metody chemii kwantowej do obliczeń biomolekuł OP1A _U04

K_U05 Umie identyfikować proste biomolekuły na podstawie analizy widm uzyskanych za pomocą poznanych spektroskopii OP1A _U05

Kompetencje społeczne (postawy)

K_K02 Wykazuje aktywną postawę w dążeniu do poznawania metod oraz programów do modelowania struktur OP1A _K02

K_K03 Jest zdolny do rozwiązywania podstawowych problemów z zakresu identyfikacji struktur OP1A _K03

Kontakt

M.Broda, e-mail: broda@uni.opole.pl, tel: 077 452 7132