

<b>Nazwa przedmiotu</b> Chemia kwantowa cząsteczek i makrocząsteczek		<b>Kod ECTS</b> 6.5-CKCM											
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b> Wydział Chemii/ Zakład Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego													
<b>Studia</b> <table border="1"> <tr> <th>kierunek</th> <th>stopień</th> <th>tryb</th> <th>specjalność</th> <th>specjalizacja</th> </tr> <tr> <td>Biologia</td> <td>I (licencjat)</td> <td>stacjonarne</td> <td>Biologia eksperymentalna</td> <td></td> </tr> </table>				kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja	Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna	
kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja									
Biologia	I (licencjat)	stacjonarne	Biologia eksperymentalna										
<b>Nazwisko osoby prowadzącej</b> dr hab. Małgorzata Broda													
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS 3</b>											
<b>A. Formy zajęć</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>wykład, (W)</li> <li>laboratorium (L)</li> </ul>		<b>Godziny kontaktowe</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- udział w wykładach: 15 x 1h = 15h</li> <li>- udział w laboratoriach: 15 x 2h = 30h</li> <li>- konsultacje 1h</li> <li>Razem 46h = 2 p. ECTS</li> </ul>											
<b>B. Sposób realizacji</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>zajęcia w sali dydaktycznej</li> </ul>		<b>Praca własna studenta</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- przygotowanie do laboratoriów 15h</li> <li>- przygotowanie do egzaminu na ocenę 15h</li> <li>Razem 30h = 1 p. ECTS</li> </ul>											
<b>C. Liczba godzin</b> 15W, 30L		W (1p. ECTS) + L (2 p. ECST)											
<b>Status przedmiotu</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>do wyboru</li> </ul>		<b>Język wykładowy</b> polski											
<b>Metody dydaktyczne</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>wykład z prezentacją multimedialną</li> <li>laboratorium: rozwiązywanie problemów obliczeniowych; prezentacje przygotowane przez studentów</li> </ul>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wy-magania egzaminacyjne</b>											
		<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Sposób zaliczenia</b></li> <li>wykład: egzamin pisemny</li> <li>laboratorium: zaliczenie z oceną</li> </ul>											
		<b>B. Formy zaliczenia</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>egzamin pisemny</li> <li>laboratorium: ustalenie oceny zaliczeniowej w oparciu o oceny częściowe otrzymywane w trakcie semestru na podstawie aktywnego uczestnictwa w dyskusji</li> </ul>											
		<b>C. Podstawowe kryteria</b> wykład: do zdania egzaminu konieczne jest udzielenie poprawnych odpowiedzi na co najmniej 50% zadanych pytań laboratorium: ocenę zaliczeniową ustala się na podstawie ocen częściowych											
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>													
A. <u>Wymagania formalne</u> : brak wymagań wstępnych B. <u>Wymagania wstępne</u> : brak wymagań wstępnych													
<b>Cele przedmiotu</b> 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 Bohra. Hipoteza de Broglie'a. Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Funkcja falowa. Operatory. Równania Schrödingera. Częstka 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: półempiryczne 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	<b>Wiedza</b> K_W03 zna podstawy metod służących do opisu prostych układów kwantowych OP1A_W01 K_W05 definiuje podstawowe pojęcia chemii kwantowej OP1A_W02
	<b>Umiejętności</b> 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
	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b> 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](mailto:broda@uni.opole.pl), tel: 077 452 7132