

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Podejścia heurystyczne i oszacowania jakościowe w wyjaśnianiu mechanizmów mikroskopowych
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot	Wydział Chemii
Język przedmiotu	Polski
Efekty kształcenia dla przedmiotu ujęte w kategoriach: wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych	<p>W zakresie wiedzy: Doktorant rozumie sposób stosowania prostych podejść heurystycznych w akademickiej dydaktyce chemicznych przedmiotów teoretycznych; Zna główne mechanizmy jakościowe rządzące funkcjonowaniem świata mikroskopowego, w szczególności w odniesieniu do tematyki prowadzonych przezeń badań naukowych.</p> <p>W zakresie umiejętności: Doktorant potrafi wyciągać wnioski fizyczne na podstawie prostych rozumowań heurystycznych; Potrafi przedstawić przykładowe rozumowanie tego rodzaju w sposób przejrzysty i zrozumiały dla słabo zaawansowanego słuchacza; Potrafi podać przykłady zastosowań takiego sposobu rozumowania w kontekście swoich zainteresowań badawczych.</p> <p>W zakresie kompetencji: Doktorant ma świadomość potrzeby stosowania prostych podejść heurystycznych w akademickiej dydaktyce chemicznych przedmiotów teoretycznych; Ma świadomość konieczności zachowania przy tym właściwej proporcji pomiędzy ścisłością merytoryczną a heurystycznymi uproszczeniami.</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Fakultatywny
Semestr/rok	Do wyboru przez słuchaczy
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Piotr Petelenz
Imię i nazwisko osoby/osób egzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot	
Sposób realizacji	Wykład
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczony kurs matematyki i chemii teoretycznej; znajomość rachunku różniczkowego i całkowego oraz algebry macierzy, a także mechaniki klasycznej i kwantowej
Liczba punktów ECTS przypisana przedmiotowi	3 ECTS
Bilans punktów ECTS	Udział w wykładach - 15 godz. Samodzielne opanowanie omówionego materiału i studiowanie zaleconej literatury - 45 godz.

	<p>Przygotowanie do egzaminu oraz obecność na egzaminie - 30 godz.</p> <p>Łączny nakład pracy doktoranta: 90 godz., co odpowiada 3 punktom ECTS</p>
Stosowane metody dydaktyczne	<p>Metody podające - wykład informacyjny</p> <p>Metody problemowe - wykład problemowy</p>
Metody sprawdzania i oceny efektów kształcenia uzyskanych przez doktorantów	Egzamin ustny
Forma i warunki zaliczenia przedmiotu, w tym zasady dopuszczenia do egzaminu, zaliczenia, a także forma i warunki zaliczenia przedmiotu	Zdanie egzaminu z wynikiem co najmniej dostatecznym
Treści przedmiotu*	<p>Integrujące potraktowanie metodyki nauczania nauk ścisłych: maksimum wglądu fizycznego przy minimum formalizmu; kilka ogólnych zasad o charakterze paradygmatycznym i przykłady ich zastosowania; wykorzystanie „klasycznych” i „nowoczesnych” środków dydaktycznych. Prosta analiza wymiarowa: rola jakobianu w twierdzeniu o zmianie zmiennych w całe wielokrotnej (zastosowania w mechanice statystycznej i kwantowej). Podobieństwo mechaniczne: trzecie prawo Keplera. Zasada nieoznaczoności Heisenberga i jej konsekwencje (wstęp – heurystyczny model klasyczny): cząstka swobodna a cząstka w pudle – 1 wymiar (energie własne a węzły funkcji falowej); oscylator harmoniczny – energia drgań zerowych, obszary niedostępne klasycznie; nieodróżnialność cząstek kwantowych – zakaz Pauliego. Heurystyczne spojrzenie na rozkład kanoniczny: rozkład Boltzmanna, oszacowania oparte na zasadzie ekwipartycji energii, ciepło właściwe oscylatora klasycznego a kwantowego, rozkład Fermiego-Diraca – ciepło właściwe gazu elektronowego w metalu. Postulat Plancka o entropii – ciała nieplanckowskie. Zasada nieoznaczoności a procesy nieodwracalne.</p> <p>Molekularna mechanika kwantowa: energetyka rotatora sferycznego, przybliżenie Borna-Oppenheimera i odchylenia od niego (statyczny i dynamiczny efekt Jahn-Tellera, przejścia bezradiacyjne). Przybliżenie Hartree-Focka: energetyka wzbudzeń singletowych a trypletowych. Przybliżenie Mullikena: szacowanie całek w metodach półempirycznych chemii kwantowej.</p>
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	<p>L.D.Landau, J.M.Lifszyc, <i>Mechanika</i>, PWN 2011;</p> <p>P.W.Atkins, <i>Molekularna mechanika kwantowa</i>, PWN 1974;</p> <p>A.B.Migdał, <i>Jakościowe metody w teorii kwantowej</i>, PWN 1980.</p>

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.