

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Wykład monograficzny - Wprowadzenie do kwantowej chemii komputerowej		13.3.0440	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Fizycznej.			
<b>Studia</b>			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia i technologia środowiska, chemia biomedyczna, chemia
		specjalnościowy	obliczeniowa, analityka i diagnostyka chemiczna
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Janusz Rak			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		3	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 40 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
<b>Cykl dydaktyczny</b>			
2017/2018 letni			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
Wykład z prezentacją multimedialną		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		kolokwium	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		przedmiot zaliczą osoby, które poprawnie odpowiedzą na co najmniej 51% pytań egzaminacyjnych. Studenci, którzy nie uzyskają wymaganego progu zaliczeniowego, przystępują do egzaminu ustnego.	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student podczas zaliczenia odpowiada na pytania dotyczące metody Hartree-Focka (K_W05, K_W11), klasycznych metod uwzględniających korelację elektronową oraz metody DFT (K_W05, K_W11).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Student krytycznie analizuje problemy chemii komputerowej, również te, które nie posiadają w danym momencie jednoznacznego rozwiązania i w celu ich rozwiązania uczestniczy w konsultacjach z prowadzącym przedmiot (K_K01).			
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>			
<b>A. Wymagania formalne</b>			
Chemia fizyczna, chemia kwantowa			
<b>B. Wymagania wstępne</b>			
Umiejętność opisu reakcji chemicznej w kategoriach termodynamicznych i kinetycznych, znajomość podstaw spektroskopii molekularnej.			
<b>Cele kształcenia</b>			
Przygotowanie studentów do doboru właściwej metody chemii komputerowej do analizy specyficznego problemu chemicznego, zaprojektowania algorytmu obliczeniowego zapewniającego możliwie szybkie rozwiązanie problemu oraz oceny dokładności uzyskanego rezultatu numerycznego.			
<b>Treści programowe</b>			

Przybliżenie Borna-Oppenheimera, równanie Schrödingera niezależne od czasu. przybliżenie jednoelektronowe, wyznacznik Sla-tera, metoda Hartree-Focka (HF) i Hartree-Focka-Roothana (HFR), półempiryczne schematy metody HFR: CNDO, INDO, ND-DO, modyfikowane metody NDDO: MNDO, AM1, PM3, PM5, RM1, PM6, MNDO/d, SAM1, SAM1d. Bazy funkcyjne. Korelacja elektronowa: metoda mieszania konfiguracji (CI), rachunek zaburzeń Mollera-Plesseta (MPn), metoda sprzężonych klasterów (CC). Metody funkcjonału gęstości (DFT). Zastosowania metody HFR oraz metod skorelowanych: dobór bazy funkcyjnej, optymalizacja geometrii molekuly, wyznaczanie entalpii reakcji. harmoniczných modów normalnych (widmo IR), przesunięć NMR oraz widm elektronowych układu molekularnego.

### Wykaz literatury

#### A. Literatura wymagana do zaliczenia zajęć:

Lucjan Piel „Idee chemii kwantowej”, PWN 2003.

Frank Jensen „Introduction to Computational Chemistry”, Wiley, 2006.

Christopher J. Cramer „Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”, Wiley, 2004.

#### B. Literatura uzupełniająca:

Attila Szabo, Neil S. Ostlund „Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory”, Dover Publications, 1996.

### Efekty kształcenia

#### (obszarowe i kierunkowe)

K\_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;

K\_W11: wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie;

K\_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;

### Wiedza

- ma ogólną wiedzę w zakresie podstawowych koncepcji, zasad i teorii funkcjonujących w komputerowej chemii kwantowej,
- charakteryzuje metodę Hartree-Focka oraz ma wiedzę na temat stosowanych przybliżeń i ograniczeń metody,
- wymienia bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach kwantowochemicznych,
- rozpoznaje metody uwzględniające korelacją elektronową,
- charakteryzuje metody funkcjonału gęstości,
- wymienia zastosowania metod chemii kwantowej.

### Umiejętności

#### Kompetencje społeczne (postawy)

- pracuje samodzielnie,
- zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.

### Kontakt

janusz.rak@ug.edu.pl