


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wykład monograficzny - Wprowadzenie do kwantowej chemii komputerowej		13.3.0440	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Fizycznej.			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia i
		specjalnościowy	technologia środowiska, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Janusz Rak			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 35 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2022/2023 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		- zaliczenie ustne	
		- kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	
		przedmiot zaliczą osoby, które poprawnie odpowiedzą na co najmniej 51% pytań zaliczeniowych. Studenci, którzy nie uzyskają wymaganego progu, przystępują do zaliczenia ustnego.	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Ocena poprawności odpowiedzi na pytania dotyczące metody Hartree-Focka (K_W01, K_W05, K_W11), klasycznych metod uwzględniających korelację elektronową oraz metody DFT (K_W05, K_W11).			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Ocena aktywności studenta na zajęciach i uczestniczenia w konsultacjach (K_K01).			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
Chemia fizyczna, chemia kwantowa			
B. Wymagania wstępne			
Umiejętność opisu reakcji chemicznej w kategoriach termodynamicznych i kinetycznych, znajomość podstaw spektroskopii molekularnej.			

Cele kształcenia	
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.	
Treści programowe	
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 klastrów (CC). Metody funkcjonału gęstości (DFT). Zastosowania metody HFR oraz metod skorelowanych: dobór bazy funkcyjnej, optymalizacja geometrii molekuly, wyznaczanie entalpii reakcji. harmonicznych modów normalnych (widmo IR), przesunięć NMR oraz widm elektronowych układu molekularnego.	
Wykaz literatury	
A. Literatura wymagana do zaliczenia zajęć:	
Lucjan Pielak „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.	
Kierunkowe efekty uczenia się	Wiedza
K_W01: operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych;	<ul style="list-style-type: none"> • 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 korelację elektronową, • charakteryzuje metody funkcjonału gęstości, • wymienia zastosowania metod chemii kwantowej.
K_W05: operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;	
K_W11: wykazuje się pogłębioną 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;	
	Umiejętności
	Kompetencje społeczne (postawy)
	<ul style="list-style-type: none"> • pracuje samodzielnie, • zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.
Kontakt	
janusz.rak@ug.edu.pl	