


**KAPITAŁ LUDZKI**  
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez  
 Unię Europejską w ramach  
 Europejskiego Funduszu  
 Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
 EUROPEJSKI  
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Wykład monograficzny - Wprowadzenie do kwantowej chemii komputerowej		13.3.1034	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Fizycznej.			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		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 – 20 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		Praca własna studenta – 25 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 75 godz. – 3 pkt. ECTS	
Wykład: 30 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2023/2024 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 uczenia się</b>			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy: Przeprowadzenie sprawdzianu pisemnego złożonego z pytań odnoszących się do materiału realizowanego podczas wykładów.			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności: Podczas pisemnego zaliczenia student wykazuje się umiejętnością posługiwania się prawidłową terminologią i nomenklaturą oraz umiejętnością przedstawiania wybranych zagadnień z zakresu materiału realizowanego podczas zajęć.			
Sposób weryfikacji kompetencji społecznych: Ocena studenta pod kątem aktywności w czasie zajęć, brania udziału w dyskusji podczas zajęć i w czasie konsultacji. Ocena stosunku do prowadzącego i innych studentów			
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>			
<b>A. Wymagania formalne</b>			
brak			

<b>B. Wymagania wstępne</b> brak	
<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 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.	
<b>Wykaz literatury</b> 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.	
<b>Kierunkowe efekty uczenia się</b> K_BChII_W01 – zna i rozumie w pogłębiony sposób złożone procesy fizykochemiczne oraz potrafi analizować ich przebieg w powiązaniu z innymi dziedzinami nauki K_BChII_W05 – zna i rozumie główne kierunki rozwoju chemii w połączeniu z ekonomią jako dwiema przenikającymi się dyscyplinami naukowymi K_BChII_U01 – potrafi w oparciu o posiadaną wiedzę zaproponować rozwiązanie problemów z chemii z uwzględnieniem aspektu ekonomicznego przy zastosowaniu zaawansowanych technik pomiarowych i analitycznych K_BChII_U02 – potrafi określić swoje zainteresowania, rozwijać je w ramach wybranego kierunku i w powiązaniu z tematyką pracy magisterskiej realizując proces samokształcenia i planowania swojej kariery zawodowej K_BChII_K04 – jest gotów do właściwej oceny zdobytej wiedzy, jej poszanowania i rozpowszechniania w celu rozwiązywania określonych zagadnień poznawczych i praktycznych	<b>Wiedza</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• ma ogólną wiedzę w zakresie podstawowych koncepcji, zasad i teorii funkcjonujących w komputerowej chemii kwantowej,</li> <li>• charakteryzuje metodę Hartree-Focka oraz ma wiedzę na temat stosowanych przybliżeń i ograniczeń metody,</li> <li>• wymienia bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach kwantowochemicznych,</li> <li>• rozpoznaje metody uwzględniające korelacją elektronową,</li> <li>• charakteryzuje metody funkcjonału gęstości,</li> <li>• wymienia zastosowania metod chemii kwantowej.</li> </ul> <b>Umiejętności</b> potrafi scharakteryzować przybliżenie Borna-Oppenheimera i opisać równanie Schrödingera, umie posługiwać się półempirycznymi schematami metod HFR: CNDO, INDO, ND-DO i ich modyfikacjami NDDO: MNDO, AM1, PM3, PM5, RM1, PM6, MNDO/d, SAM1, SAM1d, umie dokonać wyboru właściwej bazy funkcyjnej i zastosować ją w obliczeniach z zakresu kwantowej chemii komputerowej.
	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• pracuje samodzielnie,</li> <li>• zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.</li> </ul>
<b>Kontakt</b> janusz.rak@ug.edu.pl	