


**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>  |                  |   |                         |
| 2024/2025 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:<br>Przeprowadzenie sprawdzianu pisemnego złożonego z pytań odnoszących się do materiału realizowanego podczas wykładów.  |                  |   |                         |
| Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:<br>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:<br>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><br>brak  |   |
| <b>Cele kształcenia</b><br>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><br>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. harmonicznym modów normalnych (widmo IR), przesunięć NMR oraz widm elektronowych układu molekularnego.  |   |
| <b>Wykaz literatury</b><br>A. Literatura wymagana do zaliczenia zajęć:<br>Lucjan Pielak „Idee chemii kwantowej”, PWN 2003.<br>Frank Jensen „Introduction to Computational Chemistry”, Wiley, 2006.<br>Christopher J. Cramer „Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”, Wiley, 2004.<br>B. Literatura uzupełniająca:<br>Attila Szabo, Neil S. Ostlund „Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory”, Dover Publications, 1996.  |   |
| <b>Kierunkowe efekty uczenia się</b><br>K_BChII_W01 – zna i rozumie w pogłębiony sposób złożone procesy fizykochemiczne oraz potrafi analizować ich przebieg w powiązaniu z innymi dziedzinami nauki<br>K_BChII_W05 – zna i rozumie główne kierunki rozwoju chemii w połączeniu z ekonomią jako dwiema przenikającymi się dyscyplinami naukowymi<br>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<br>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<br>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><br><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><br>potrafi scharakteryzować przybliżenie Borna-Oppenheimera i opisać równanie Schrödingera,<br>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,<br>umie dokonać wyboru właściwej bazy funkcyjnej i zastosować ją w obliczeniach z zakresu kwantowej chemii komputerowej. |
|  | <b>Kompetencje społeczne (postawy)</b><br><ul style="list-style-type: none"> <li>• pracuje samodzielnie,</li> <li>• zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.</li> </ul>   |
| <b>Kontakt</b><br>janusz.rak@ug.edu.pl   |   |