



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		13.3.1034	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Fizycznej.			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		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 – 20 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		Praca własna studenta – 25 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. – 3 pkt. ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2021/2022 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	
		kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	
		przedmiot zaliczą osoby, które poprawnie odpowiedzą na co najmniej 51% pytań egzaminacyjnych. Studenci, którzy nie uzyskają wymaganego progu zaliczeniowego, przystępują do egzaminu ustnego.	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
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			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
brak			

B. Wymagania wstępne brak	
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. harmonicznym 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 kształcenia K_BChII_W01 – zna i rozumie 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_U09 – potrafi określić swoje zainteresowania i rozwijać je w ramach wybranej tematyki pracy magisterskiej, realizując jednocześnie proces samokształcenia oraz planowania przyszłej kariery zawodowej K_BChII_K04 – jest gotów do właściwej oceny zdobytej wiedzy, jej poszanowania i rozpowszechniania w celu rozwiązywania określonych zagadnień poznawczych i praktycznych	Wiedza <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 korelacją elektronową, • charakteryzuje metody funkcjonału gęstości, • wymienia zastosowania metod chemii kwantowej. Umiejętności 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.
	Kompetencje społeczne (postawy) <ul style="list-style-type: none"> • pracuje samodzielnie, • zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.
Kontakt janusz.rak@ug.edu.pl	