



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			
Faculty of Chemistry			
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 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 40 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 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:			
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).			
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 klasterów (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 Pielą „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)	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 korelację elektronową, • charakteryzuje metody funkcjonału gęstości, • wymienia zastosowania metod chemii kwantowej.
	Umiejętności
	Kompetencje społeczne (postawy)
<p>K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;</p> <p>K_W11: wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie;</p> <p>K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;</p>	<ul style="list-style-type: none"> • pracuje samodzielnie, • zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.
Kontakt	
janusz.rak@ug.edu.pl	