

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Oddziaływania międzycząsteczkowe
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot	Wydział Chemii
Język przedmiotu	Polski
Efekty kształcenia dla przedmiotu ujęte w kategoriach: wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych	<p>W zakresie wiedzy:</p> <p>Doktorant rozumie założenia i zna główne pojęcia z dziedziny oddziaływań międzycząsteczkowych; Zna główne mechanizmy oddziaływań, rodzaje potencjałów międzycząsteczkowych opisujących oddziaływania w różnych układach; Posiada znajomość metod matematycznych używanych w teoriach opisujących oddziaływania międzycząsteczkowe; Zna obecny stan wiedzy w zakresie spektroskopii i teorii układów z wiązaniami wodorowymi; Posiada znajomość teorii widm oscylacyjnych kompleksów, kryształów i cieczy z wiązaniami wodorowymi, widm oscylacyjnych lodów i wodnych roztworów jonowych; Zna teorie wielowymiarowego tunelowania protonu w układach z wiązaniami wodorowymi.</p> <p>W zakresie umiejętności:</p> <p>Doktorant potrafi wyciągać wnioski, kojarzyć analogie i różnice pomiędzy modelowymi przypadkami fizycznymi; Potrafi odnieść pojęcia teorii oddziaływań międzycząsteczkowych do swojej specjalności naukowej i podać przykłady jej zastosowań w kontekście swoich zainteresowań badawczych.</p> <p>W zakresie kompetencji:</p> <p>Doktorant ma świadomość różnorodności przybliżeń granicznych używanych w teorii oddziaływań międzycząsteczkowych w zależności od kontekstu interpretacyjnego, w szczególności w odniesieniu do swojej dyscypliny badawczej; Ma świadomość rozwoju oprogramowania specjalistycznego z tego zakresu i konieczności aktualizacji wiedzy na jego temat.</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Fakultatywny
Semestr/rok	Do wyboru przez słuchacza
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Marek Wójcik
Imię i nazwisko osoby/osób egzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot	
Sposób realizacji	Wykład
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczony kurs matematyki, chemii teoretycznej i

	spektroskopii molekularnej; znajomość rachunku różniczkowego i całkowego, a także mechaniki klasycznej i kwantowej
Liczba punktów ECTS przypisana przedmiotowi	6 ECTS lub 3 ECTS
Bilans punktów ECTS	Udział w wykładach - 30 godz. Samodzielne opanowanie omówionego materiału i studiowanie zalecanej literatury - 90 godz. Przygotowanie do egzaminu oraz obecność na egzaminie - 60 godz. Łączny nakład pracy doktoranta: 180 godz., co odpowiada 6 punktom ECTS.
Stosowane metody dydaktyczne	Metody podające - wykład informacyjny Metody problemowe - wykład problemowy
Metody sprawdzania i oceny efektów kształcenia uzyskanych przez doktorantów	Egzamin ustny
Forma i warunki zaliczenia przedmiotu, w tym zasady dopuszczenia do egzaminu, zaliczenia, a także forma i warunki zaliczenia przedmiotu	Zdanie egzaminu z wynikiem co najmniej dostatecznym
Treści przedmiotu*	Przedmiot i jego specyfika. Krótki przegląd historyczny. Metoda supermolekularna i metoda perturbacyjna. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Rozwinięcie multipolowe. Energia elektrostatyczna w przedstawieniu multipolowym. Energia indukcyjna. Energia dyspersyjna. Oddziaływania van der Waalsa. Składowe energii oddziaływań. Potencjały modelowe. Potencjał hard-sphere, Leonarda-Jonesa, Buckinghamama, Morse'a, Rydberga, Pöschla-Tellera, Kratzera, Dunhama, Keesoma, Stockmayera. Glue model. Potencjał Stillinger-Webera. Wyznaczanie parametrów potencjałów modelowych. Występowanie i znaczenie wiązań wodorowych. Definicja wiązania wodorowego, kryteria geometryczne i energetyczne. Wiązania wodorowe wewnątrz i międzycząsteczkowe. Właściwości układów z wiązaniami wodorowymi. Widma w podczerwieni wiązań wodorowych. Teorie widm podczerwonych pojedynczych wiązań wodorowych i układów oddziałujących wiązań wodorowych. Rezonans Fermiego i jego występowanie w widmach silnych wiązań wodorowych. Potencjały modelowe dla wiązań wodorowych i ich wykorzystanie do wyjaśnienia korelacji spektralnych i strukturalnych w układach z wiązaniami wodorowymi. Potencjały wewnątrz- i międzycząsteczkowe dla wody. Widma wiązań wodorowych w lodach i wodnych roztworach jonowych. Teoretyczna symulacja widm lodów i roztworów wodnych z wykorzystaniem metody dynamiki molekularnej. Tunelowanie protonu w układach z wiązaniami wodorowymi. Teorie wielowymiarowego tunelowania protonu.
Wykaz literatury podstawowej	I.G. Kaplan, <i>Intermolecular Interactions</i> , Wiley, 2006, chap.

i uzupełniającej*	1,2,5. L. Piela, <i>Idee chemii kwantowej</i> , PWN, Warszawa, 2003, rozdz. 13, dodatek V. P. Schuster, G. Zundel and C. Sandorfy, Eds., <i>The Hydrogen Bond, Recent Developments in Theory and Experiments</i> , North Holland. 1976. Y. Maréchal, A. Witkowski, <i>Infrared Spectra of H-Bonded Systems</i> , J. Chem. Phys. 48, 3697 (1968). M.J. Wójcik, <i>Theoretical Modeling of Vibrational Spectra and Multidimensional Proton Tunneling in Hydrogen-Bonded Systems</i> , wykłady + Power Point.
-------------------	--

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.