

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Stosowana chemia kwantowa
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: Doktorant rozumie założenia i zna główne pojęcia oraz przybliżenia metod obliczeniowych chemii kwantowej oraz ich konsekwencje dla stosowalności tych metod; Zna typowe metody obliczeniowe chemii kwantowej.</p> <p>W zakresie umiejętności: Doktorant potrafi planować obliczenia kwantowo-chemiczne dla wybranych właściwości fizykochemicznych; Potrafi interpretować wyniki i oceniać ich wiarygodność; Potrafi kojarzyć właściwości na poziomie molekularnym z mechanizmami zjawisk fizykochemicznych;</p> <p>W zakresie kompetencji: Doktorant ma świadomość zakresu przybliżeń używanych w metodach chemii kwantowej, w szczególności w odniesieniu do swojej dyscypliny badawczej; Ma świadomość rozwoju oprogramowania specjalistycznego z tego zakresu i konieczności aktualizacji wiedzy na jego temat; Przestrzega reguł ścisłości i uczciwości naukowej.</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Fakultatywny
Semestr/rok	Do wyboru przez słuchacza
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Ewa Broclawik
Imię i nazwisko osoby/osób egzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot	
Sposób realizacji	Wykład wspomagany metodą przypadku opartą o warsztaty komputerowe, zakończony projektem własnym
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczony kurs chemii teoretycznej; znajomość podstaw mechaniki i chemii kwantowej oraz podstawowej obsługi systemów operacyjnych i korzystania z oprogramowania kwantowo-chemicznego
Liczba punktów ECTS przypisana przedmiotowi	6 ECTS lub 3 ECTS
Bilans punktów ECTS	Udział w wykładach - 30 godz. Samodzielne opanowanie omówionego materiału, przeprowadzenie i opracowanie obliczeń, studiowanie zalecanej literatury - 120 godz. Przygotowanie do egzaminu oraz obecność na egzaminie - 30 godz.

	Łączny nakład pracy doktoranta: 180 godz., co odpowiada 6 punktom ECTS.
Stosowane metody dydaktyczne	Metody podające - wykład informacyjny Metody problemowe - wykład problemowy oraz metoda przypadków Metody programowane z użyciem symulacji komputerowych
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*	Podstawowe przybliżenia: Stany stacjonarne i przybliżenie Borna-Oppenheimera; Przybliżenie jednoelektronowe; Funkcja wieloelektronowa (wyznacznik Slatera), spinorbital – orbital, energia korelacji; konfiguracja elektronowa a funkcja wyznaczkowa; Metoda Hartee-Focka, metoda LCAO MO, orbitale molekularne; Interpretacja równań Hartee-Focka: potencjały jonizacyjne (na przykładzie N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ), postać orbitali molekularnych; Układy zamknięto- i otwartopowłokowe: metody RHF i UHF (na przykładzie dysocjacji cząsteczki HF); Optymalizacja geometrii, drgania normalne, analiza wibracyjna; Podstawowe pojęcia DFT; Elementy metody mieszania konfiguracji (CI) na przykładzie dysocjacji cząsteczki wodoru.
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	Joanna Sadlej <i>Obliczeniowe metody chemii kwantowej</i> CDNO, INDO, NDDO, <i>ab initio</i> , PWN Warszawa 1988. Alojzy Gołębiewski, <i>Elementy mechaniki i chemii kwantowej</i> , PWN Warszawa 1982; Włodzimierz Kołos, Joanna Sadlej. <i>Atom i cząsteczka</i> Warszawa Wydaw. Nauk.-Techn., 1998 Włodzimierz Kołos, <i>Chemia kwantowa</i> , PWN Warszawa 1986; Lucjan Piela, <i>Idee chemii kwantowej</i> , PWN Warszawa 2003;

\* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.