

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Teoria informacji
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 główne pojęcia, zasady i techniki teorii informacji oraz jej jednoczący charakter w nauce. Zna główne klasyczne miary zawartości informacyjnej rozkładów prawdopodobieństw, ich uogólnienia kwantowe, wprowadzające wkłady od prądów/fazy, oraz wynikające z nich źródła w równaniu ciągłości. Zna entropowe zasady wariacyjne oraz ich związek z mechaniką kwantową, zmiany w rozkładzie informacji towarzyszące tworzeniu wiązań chemicznych, oraz zaznajamia się z komunikacyjną teorią wiązania chemicznego stosującą rozdzielczość orbitalną.</p> <p>Doktorant dysponuje wiedzą o alternatywnych perspektywach chemicznej interpretacji wyników obliczeń kwantowo-mechanicznych, w tym lokalne funkcje lokalizacji elektronów i wiązań chemicznych w cząsteczce, zna elementy teorii informacyjnych miar krotności wiązań oraz ich odpowiedniki w teorii orbitali molekularnych.</p> <p>W zakresie umiejętności:</p> <p>Doktorant potrafi wykorzystać uzyskane podstawy do komplementarnej, informacyjnej interpretacji kwantowej struktury elektronowej układów molekularnych i reakcyjnych. Potrafi zastosować ten „arsenał” środków interpretacyjnych do rozkładów elektronowych w cząsteczkach, wyznaczonych teoretycznie lub na drodze eksperymentalnej. Widzi informacyjny związek między mechaniką kwantową i teorią informacji, oraz poznaje elementy entropowej reprezentacji stanów molekularnych.</p> <p>W zakresie kompetencji:</p> <p>Doktorant ma świadomość jednoczącego charakteru teorii informacji w chemii, fizyce i biologii, poznaje nowe techniki interpretacyjne, które może świadomie stosować i rozwijać w swojej dyscyplinie badawczej. Ma świadomość alternatywnych, komplementarnych perspektyw na stany cząsteczek oraz ich fragmentów, które łącznie dają głębsze zrozumienie reaktywności chemicznej, stanów atomów związanych i struktury wiązań chemicznych.</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Fakultatywny
Semestr/rok	Do wyboru przez słuchacza
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Roman F. Nalewajski

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 i chemii teoretycznej; znajomość rachunku różniczkowego i całkowego oraz algebry macierzy, 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 - 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
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*	Klasyczne miary informacji: informacja Fishera, entropia Shannona, oraz entropia krzyżowa Kullbacka-Leiblera (odległość informacyjna). Kwantowe uogólnienia miar informacji łączące wkłady od prawdopodobieństw oraz ich prądów. Równanie ciągłości dla informacji. Kanały komunikacyjne, ich deskryptory szumu (entropii warunkowej) i przepływu informacji (wzajemnej informacji), oraz alternatywne poziomy redukcji. Zasady ekstremalnej informacji fizycznej oraz ich przykłady w molekularnej mechanice kwantowej. Informacyjna analiza molekularnych gęstości elektronowych: efekty wiązań chemicznych, funkcje lokalizacji elektronów (ELF) i wiązań, tzw. <i>kontra-gradiencji</i> (CG). Atomy związane w teorii informacji: atomy giełdowe Hirshfelda oraz ich uogólnienia. Cząsteczka jako „układ komunikacyjny” oraz entropowe indeksy krotności wiązań globalnej krotności wiązania chemicznego układu molekularnego i jego składowych kowalencyjnej i jonowej. Indeksy wiązań zlokalizowanych. Molekularne systemy informacyjne w rozdzielczości orbitalnej i ich zastosowania w chemii. Bezpośredni i pośredni mechanizm wiązań chemicznych. Przykłady zastosowań teorii informacji do układów reakcyjnych.
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	N. Abramson, <i>Teoria informacji i kodowania</i> . PWN, Warszawa, 1969.

	<p>A. Dąbrowski, <i>O teorii Informacji</i>. Wydawnictwo Szkolne i Pedagogiczne, Warszawa, 1974.</p> <p>B. R. Frieden, <i>Physics from Fisher Information – A Unification</i>. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.</p> <p>R. F. Nalewajski, <i>Information Theory of Molecular Systems</i>. Elsevier, Amsterdam, 2006 .</p> <p>R. F. Nalewajski, <i>Information Origins of the Chemical Bond</i>. NOVA, New York, 2010.</p> <p>R. F. Nalewajski, <i>Perspectives in Electronic Structure Theory</i>. Springer-Verlag, Heidelberg, 2012.</p>
--	--

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.