

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Zaawansowane metody chemii kwantowej
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 teoretycznych metod wyznaczania struktury elektronowej cząsteczek. Zna podstawy obu współczesnych nurtów obliczeniowych wynikających z: teorii funkcji falowej (WFT) oraz teorii funkcjonałów gęstości (DFT). Dysponuje wiedzą n/t alternatywnych perspektyw chemicznej interpretacji i zrozumienia otrzymanych rezultatów, w tym elementy teorii reaktywności chemicznej oraz kwantowych miar krotności wiązań.</p> <p>W zakresie umiejętności: Doktorant potrafi ocenić zalety i ograniczenia stosowanych metod, z uwzględnieniem niejednoznaczności pojęć chemicznych w mechanice kwantowej. Potrafi świadomie zaplanować własne obliczenia metodami chemii kwantowej, w ramach swojej specjalności naukowej, w zależności od celów poznawczych i wymaganej dokładności, odnieść pojęcia mechaniki kwantowej do poznanych wcześniej intuicyjnych pojęć chemicznych, oraz podać przykłady zastosowań chemii kwantowej w kontekście swoich zainteresowań badawczych.</p> <p>W zakresie kompetencji: Doktorant ma świadomość różnorodności i komplementarności stosowanych modeli i przybliżeń chemii kwantowej układów molekularnych, w zależności od celów interpretacyjnych i poznawczych, w szczególności w odniesieniu do swojej dyscypliny badawczej, oraz konieczności ciągłego rozwoju metodologii i oprogramowania specjalistycznego z tego zakresu, jak też ciągłej 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	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*	Równoważność teorii funkcji falowej (WFT) i teorii funkcyjałów gęstości (DFT). Elementy WFT: problem korelacji elektronowej, metoda mieszania konfiguracji oraz teorie oddziaływania par elektronowych; reprezentacja drugiego kwantowania, przestrzeń Focka, klasterowe rozwinięcie funkcji falowej, metoda sprzężonych klasterów; podstawy uogólnionej teorii wiązań walencyjnych. Elementy DFT: twierdzenia Hohenberga-Kohna oraz ich uogólnienia, teoria Kohna-Shama, funkcyjały z jednorodnego skalowania gęstości, lokalne i gradientowe przybliżenia funkcyjałów gęstości dla energii; rzut oka na: funkcyjały zależne od orbitali, wykorzystanie zespołów statystycznych, teorię zależną od czasu oraz oddziaływania międzycząsteczkowe.
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	R. F. Nalewajski, <i>Perspectives in Electronic Structure Theory</i> . Springer-Verlag, Heidelberg 2012. R. F. Nalewajski, <i>Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady</i> , PWN, Warszawa 2001. P. R. Surjan, <i>Second Quantized Approach to Quantum Chemistry: An Elementary Introduction</i> . Springer-Verlag, Berlin, 1989. P. Jørgensen, J. Simons, <i>Second-Quantization-Based Methods in Quantum Chemistry</i> . Academic Press, New York, 1981. R. G. Parr, W. Yang, <i>Density Functional Theory of Atoms and Molecules</i> . Oxford University Press, New York 1989. R. M. Dreizler, E. K. U. Gross, <i>Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-Body Problem</i> . Springer-Verlag, Heidelberg 1990. R. F. Nalewajski, Ed., <i>Density Functional Theory I-IV</i> ,

	Topics in Current Chemistry 180-183 , Springer-Verlag, Heidelberg, 1996.
--	---

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.