

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład monograficzny - Wprowadzenie do kwantowej chemii komputerowej (Wykład), PG_00080897						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Janusz Rak					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. Janusz Rak					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0							
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM		
	Liczba godzin pracy studenta	30	5.0	40.0	75		
Cel przedmiotu	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.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.		Rozumie i potrafi wytłumaczyć prawidłowości, zjawiska i procesy, w szczególności potrafi samodzielnie odtworzyć podstawowe prawa i twierdzenia.		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.		Ma świadomość swojej wiedzy i umiejętności, rozumie potrzebę ciągłego doskonalenia zawodowego i rozwoju osobistego, dokonuje samooceny własnych kompetencji i doskonali umiejętności, wyznacza kierunki własnego rozwoju u kształcenia.		[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębioną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.		Dysponuje wiedzą na temat kierunków rozwoju i zastosowania chemii komputerowej.		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.		Ma pogłębioną wiedzę w zakresie podstawowych koncepcji, zasad i teorii funkcjonujących w chemii komputerowej.		[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny		

Treści przedmiotu	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.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Chemia fizyczna, chemia kwantowa, umiejętność opisu reakcji chemicznej w kategoriach termodynamicznych i kinetycznych, znajomość podstaw spektroskopii molekularnej.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. Lucjan Pielą Idee chemii kwantowej, PWN 2003. 2. Frank Jensen Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2006. 3. Christopher J. Cramer Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley, 2004. 	
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. Attila Szabo, Neil S. Ostlund Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications, 1996. 	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> 1. Założenia i przybliżenia metody HF. 2. Typy baz funkcyjnych stosowanych w obliczeniach kwantowochemicznych ich zalety i ograniczenia. 3. Co to są funkcje dyfuzyjne? Jaki jest mechanizm ich działania i kiedy się je stosuje? 4. Co to jest przybliżenie ZDO i jakie ma ono znaczenie dla metod półempirycznych? 5. Opisz krótko idee metod DFT. 		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.