

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Introduction to computational quantum chemistry (Wykład), PG_00179624						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2027/2028		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS			4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Janusz Rak				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
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		30.0		40.0	100
Cel przedmiotu	Przygotowanie do doboru właściwej metody chemii komputerowej do analizy specyficznego problemu chemicznego, zaprojektowanie algorytmu obliczeniowego zapewniającego możliwie szybkie rozwiązanie problemu oraz ocena dokładności uzyskanego rezultatu numerycznego.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań.	Pracuje systematycznie i z zachowaniem priorytetów nad zrozumieniem teorii wykorzystywanych w chemii komputerowej.	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy.	Używając wiedzy przekazanej w trakcie wykładu potrafi scharakteryzować właściwości badanych związków.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Potrafi krytycznie odnieść się do rezultatów obliczeń kwantowochemicznych oraz ocenić ich dokładność.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.	Potrafi wyszukać potrzebne informacje w czasopismach takich jak: the Journal of Physical Chemistry, Physical Chemistry Chemical Physics, the Journal of Chemical Physics itd.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_K05] Rozumie potrzebę samodzielnego wyszukiwania informacji w literaturze naukowej oraz czasopismach popularnonaukowych.	Rozumie potrzebę samodzielnego studiowania prac opublikowanych w czasopismach specjalistycznych takich jak: the Journal of Physical Chemistry, International Journal of Quantum Chemistry itp.	[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 metod chemii komputerowej, w szczególności metody funkcjonału gęstości (DFT).	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Zdaje sobie sprawę z ciągłego rozwoju chemii komputerowej i wynikających stąd ograniczeń własnej wiedzy, Rozumie potrzebę ciągłego kształcenia.	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U10] Czyta ze zrozumieniem naukowe i popularnonaukowe teksty chemiczne w języku angielskim.	Rozumie prace naukowe dotyczące zastosowań chemii komputerowej.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U11] Komunikuje się w języku obcym na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego oraz potrafi posługiwać się specjalistyczną terminologią.	Dyskutuje w języku angielskim zagadnienia dotyczące chemii kwantowej. W szczególności biegle posługuje się terminologią z zakresu chemii komputerowej.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Wykorzystuje wiedzę z chemii ogólnej nieorganicznej, organicznej i fizycznej.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Zna metody, w szczególności z zakresu algebry liniowej, stosowane do rozwiązywania równania Schroedingera.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
Treści przedmiotu	<p>Przybliżenie Borna-Oppenheimera, równanie Schrödingera niezależne od czasu. przybliżenie jednoelektronowe, wyznacznik Slatera, metoda Hartree-Focka (HF) i Hartree-Focka-Roothana (HFR), półempiryczne schematy metody HFR: CNDO, INDO, NDDO, 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 molekuli, wyznaczenie entalpii reakcji. harmonicznych modów normalnych (widmo IR), przesunięć NMR oraz widm elektronowych układu molekularnego.</p>		

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
	egzamin	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Frank Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", Wiley, 2017. 2.. Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", Wiley, 2004	
	Uzupełniająca lista lektur	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"> <li>1. Założenia i przybliżenia metody HF.</li> <li>2. Typy baz funkcyjnych stosowanych w obliczeniach kwantowochemicznych ich zalety i ograniczenia.</li> <li>3. Co to są funkcje dyfuzyjne? Jaki jest mechanizm ich działania i kiedy się je stosuje?</li> <li>4. Co to jest przybliżenie ZDO i jakie ma ono znaczenie dla metod półempirycznych?</li> <li>5. Opisz krótko idee metod DFT.</li> </ol>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.