

KARTA PRZEDMIOTU OFEROWANEGO W SZKOLE DOKTORSKIEJ

Kod przedmiotu	4606-PS-0000EGK-0281	Nazwa przedmiotu	w j. polskim	Metody chemii kwantowej: podstawy i zastosowania		
			w j. angielskim	Quantum chemistry: fundamentals and applications		
Rodzaj zajęć	specjalnościowe					
Kierownik przedmiotu	Dr hab. inż. Krzysztof Durka		Prowadzący zajęcia	Dr hab. inż. Krzysztof Durka		
Jednostka realizująca	Wydział Chemiczny	Dyscyplina/y naukowa/e	Nauki chemiczne, inżynieria chemiczna, inżynieria materiałowa			
Poziom kształcenia	kształcenie doktorantów	Semestr studiów	letni			
Język zajęć	polski					
Forma zaliczenia	Zaliczenie na ocenę	Sumaryczna liczba godzin w semestrze	24	Sumaryczna liczba ECTS	2	
Minimalna liczba uczestników	5	Maksymalna liczba uczestników	15	Dostępność dla studentów I lub II stopnia	Tak	
Typ zajęć		Wykład	Ćwiczenia audytorijne	Ćwiczenia projektowe	Laboratorium	Seminarium
Liczba godzin zajęć	tygodniowo	1			1	
	łącznie w semestrze	12			12	

1. Wymagania wstępne

Brak

2. Cele przedmiotu

Celem prowadzonego kursu jest wprowadzenie uczestników Szkoły Doktorskiej w podstawy chemii kwantowej z naciskiem na zaprezentowanie jej praktycznego wykorzystania w przewidywaniu właściwości i reaktywności związków chemicznych. Przedmiot jest podzielony na dwie części – wykłady oraz laboratoria komputerowe. Wykłady są poświęcone zagadnieniom podstawowym rozpoczynając od przedstawienia praw panujących w mikroświecie (postulaty mechaniki kwantowej), przez równanie Schrödingera i jego rozwiązanie dla kilku podstawowych modeli (elektron w kropce kwantowej, drgania i rotacje cząsteczki dwuatomowej, atom wodoru), podążając do głównego celu wykładu – czyli opisu zachowania cząsteczki chemicznej i możliwości przewidywania jej właściwości. Zostaną zaprezentowane metody chemii kwantowej takie jak metoda Hartree-Focka oraz metoda funkcjonu gęstości (DFT). Dodatkowo zostaną poruszone aspekty związane ze spektroskopią IR oraz UV-Vis (diagram Jabłońskiego). Zastosowania metod chemii kwantowej we współczesnym świecie nauki zostaną zaprezentowane na kilku wybranych przykładach. Po opanowaniu wiedzy podstawowej doktorant będzie miał możliwość wykorzystania metod chemii kwantowej w praktyce na laboratorium komputerowym. Na początku przedstawione zostanie środowisko pracy. Następnie narzędzia te zostaną wykorzystane do badania podstawowych właściwości cząsteczek chemicznych, poszukiwania najbardziej stabilnej konformacji, obliczeń energii całkowitej, momentu dipolowego, rozkładu orbitali molekularnych, rozkładu ładunków w cząsteczce, drgań molekuly, widma IR, widma NMR, widma UV-Vis, podstawowych funkcji termodynamicznych. Na zajęciach zostaną poruszone zagadnienia związane z aromatywnością, delokalizacją elektronów. Ostatnie zagadnienia będą dotyczyły obliczeń energii oddziaływania międzycząsteczkowego oraz badania mechanizmu reakcji chemicznej. Doktoranci mogą wykorzystywać swoje własne laptopy.

3. Treści programowe (dla każdego typu zajęć oddzielnie)

Wykład	
Wykład obejmuje następujące treści:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Podstawy mechaniki kwantowej (postulaty mechaniki kwantowej, konsekwencja zasady nieoznaczoności Heisenberga, pojęcie funkcji falowej, gęstości prawdopodobieństwa, energii układu) 2. Opis drgań oraz rotacji dwuatomowej cząsteczki chemicznej. Atom wodoru oraz inne atomy układu okresowego 3. Opis cząsteczki chemicznej z wykorzystaniem metod chemii kwantowej – stosowane przybliżenia (przybliżenie adiabatyczne, Borna-Oppenheimera, przybliżenie jednoelektronowe). Metoda Hartree-Focka oraz metoda funkcjonału gęstości (DFT). 4. Diagram Jabłońskiego, przejścia energetyczne, stany singletowe i trypletowe molekuł. Podstawy spektroskopii. 	
Laboratorium	
Laboratorium komputerowe obejmuje następujące zagadnienia:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Zastosowanie metod chemii kwantowej do określania optymalnej konformacji molekuly oraz jej energii 2. Obliczenia podstawowych własności molekuł (moment dipolowy, rozkład ładunku, rząd wiązania). Rozkład orbitali molekularnych w cząsteczce – orbitale zdelokalizowane a orbitale zlokalizowane. Analiza gęstości elektronowej metodą QTAIM. 3. Symulacja widm IR, UV-Vis oraz NMR. 4. Obliczenia entalpii swobodnej reakcji chemicznej 5. Zależność energii molekuly od konformacji – minima lokalne, bariera i stała szybkości izomeryzacji/rotacji. 6. Obliczenia energii oddziaływania międzycząsteczkowego. Wiązanie wodorowe oraz inne oddziaływania. 7. Mechanizm reakcji chemicznej – wyznaczenie geometrii stanu przejściowego. 	

4. Efekty uczenia się			
Rodzaj efektu	Opis efektu uczenia się	Odniesienie do efektów uczenia się w SZD	Sposób weryfikacji efektów uczenia*
Wiedza			
W01	Posiada ugruntowaną wiedzę ogólną z podstawowych działów chemii kwantowej	SD_W2	kolokwium pisemne
W02	Posiada wiedzę na temat obecnie prowadzonych badań wykorzystujących metody chemii kwantowej	SD_W3	kolokwium pisemne
Umiejętności			
U01	Posiada umiejętności rozwiązywania problemów naukowych z wykorzystaniem przyswojonej wiedzy oraz odpowiednich narzędzi	SD_U1	kolokwium pisemne
U02	Posiada umiejętność interpretacji i krytycznej dyskusji wyników prowadzonych badań, a także jest zdolny do wyciągania wniosków w celu modyfikacji wcześniej przyjętych założeń.	SD_U2	kolokwium pisemne
U03	Potrafi komunikować się z innymi naukowcami oraz prowadzić dyskusję dotyczącą wyników swoich obliczeń kwantowo-mechanicznych, w tym również potrafi zaprezentować wyniki swoich badań na konferencji naukowej.	SD_U4	ocena aktywności w trakcie zajęć
Kompetencje społeczne			
K01	Potrafi działać w sposób kreatywny, formułować problemy, szukać rozwiązań.	SD_K4	ocena aktywności w trakcie zajęć

* dozwolone sposoby weryfikacji efektów uczenia się: egzamin; egzamin ustny; kolokwium pisemne; kolokwium ustne; ocena projektu; ocena sprawozdania; ocena raportu; ocena prezentacji; ocena aktywności w trakcie zajęć; prace domowe; test

5. Kryteria oceny

Zaliczenie odbędzie się na ostatnich laboratoriach komputerowych. Doktoranci otrzymają do rozważenia kilka problemów naukowych, a do ich rozwiązania wykorzystają narzędzia obliczeniowe chemii kwantowej z pomocą odpowiedniego oprogramowania na komputerach.

Kryteria oceny:

1-4.5pkt niezaliczony

5-5.5pkt **3**

6-6.5pkt **3.5**

7-7.5pkt **4**

8-8.5pkt **4.5**

9-10pkt **5**

6. Literatura

Literatura podstawowa:

[1] Włodzimierz Kołos, Joanna Sadlej, *Atom i cząsteczka*, Warszawa, Wydaw. Nauk.-Techn., 2007.

[2] Lucjan Pielą, *Idee chemii kwantowej*, Warszawa, Wydawnictwo PWN, Warszawa 2011.

Literatura uzupełniająca:

[1] Alan Hinchliffe, *Molecular Modelling for Beginners*, John Wiley & Sons Inc, 2008.

[2] Andrew Leach. *Molecular Modelling: Principles and Applications*, ADDISON WESLEY PUB CO INC, 2001.

7. Nakład pracy studenta niezbędny do osiągnięcia efektów uczenia się**

Lp.	Opis	Liczba godzin
1	godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim wynikające z planu	30
2	Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim w ramach konsultacji, egzaminów, sprawdzianów itp.	10
3	Godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do zajęć oraz opracowania sprawozdań, projektów, prezentacji, raportów, prac domowych	10
4	godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do egzaminu, sprawdzianu, zaliczenia	5
Sumaryczny nakład pracy studenta		55
Liczba punktów ECTS		2

** 1 ECTS pracy = 25-30 godzin nakładu pracy studenta (np. 2 ECTS = 60 godzin; 4 ECTS = 110 godzin)

8. Informacje dodatkowe

Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	2
Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	