

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ

PRACOWNIK/ZESPÓŁ ZGŁASZAJĄCY/REALIZUJĄCY KURS: Robert Góra
K17W03D10

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa w języku polskim: Teoretyczne metody badania fotochemii i fotofizyki układów molekularnych

Nazwa w języku angielskim: Theoretical methods for studies of photochemistry and photophysics of molecular systems

Kurs prowadzony jest w języku polskim / angielskim*

Kurs specjalistyczny przeznaczony dla doktorantów odbywających kształcenie w danej dyscyplinie*: przedmiot interdyscyplinarny z zakresu kilku dyscyplin naukowych: chemia i fizyka teoretyczna

Kod przedmiotu: NCQ100206C

* zaznaczyć właściwe

	Wykład autorski	Lektorat	Seminarium	Różne formy
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)		-	-	30
Forma zaliczenia – na ocenę		-	-	Raport
Liczba punktów ECTS				

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1. Chemia i fizyka ogólna
2. Algebra liniowa i analiza matematyczna
3. Podstawy mechaniki kwantowej

CELE PRZEDMIOTU

C1. Zapoznanie słuchaczy z nowoczesnymi metodami teoretycznego opisu struktury elektronowej atomów i cząsteczek oraz nabycie umiejętności zastosowania tych metod do wyznaczania struktury elektronowej i właściwości układów molekularnych.

C2. Przekazanie umiejętności zastosowania metod chemii teoretycznej do przewidywania i interpretacji wybranych właściwości spektralnych układów molekularnych, w tym widm absorpcji jedno i dwukwantowej, widm emisyjnych oraz nieadiabatywnych procesów bezpromienistych (przeniesienia energii wzbudzenia, konwersji wewnętrznej i przejść międzysystemowych).

C3. Nabycie wiedzy o praktycznych zastosowaniach technik spektroskopowych oraz procesów fotochemicznych i fotofizycznych w technologii i różnych gałęziach gospodarki oraz ich znaczeniu dla społeczeństwa.

C4. Praca indywidualna nad projektem.

TREŚCI PROGRAMOWE

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

Forma zajęć – różne formy (Rf)		Liczba godzin
Rf1	Organizacja pracy w laboratorium komputerowym i centrum obliczeniowym. Omówienie zasad bezpieczeństwa i higieny pracy. Dystrybucja kont i podstawowe informacje o dostępnych systemach operacyjnych.	2
Rf2	Elementy systemu LINUX I. Podstawowe informacje o systemie operacyjnym. Wybrane polecenia powłoki BASH.	2
Rf3	Elementy systemu LINUX II. Obsługa wybranych edytorów tekstu. Proste skrypty powłoki BASH.	2
Rf4	Obliczenia struktury elektronowej w modelu Hückela dla wybranych cząsteczek. Zagadnienie własne w postaci macierzowej. Diagonalizacja hamiltonianu i interpretacja widm wartości własnych i wektorów własnych.	2
Rf5	Reprezentacja struktury geometrycznej układów molekularnych. Współrzędne ortogonalne i współrzędne wewnętrzne na przykładzie macierzy-Z.	2
Rf6	Omówienie wybranych pakietów obliczeń struktury elektronowej. Przygotowanie plików wsadowych. Obliczenia struktury elektronowej atomów w ograniczonej i nieograniczonej metodzie Hartree-Focka (HF). Struktura plików wynikowych i interpretacja wyników obliczeń.	2
Rf7	Optymalizacja geometrii równowagowej cząsteczek i analiza drgań normalnych. Omówienie algorytmów gradientowych optymalizacji geometrii równowagowej. Obliczenia widma częstości drgań cząsteczek w przybliżeniu harmonicznym. Analiza współrzędnych normalnych. Przewidywanie i interpretacja widm w podczerwieni.	2
Rf8	Teoria orbitali molekularnych. Wyznaczanie krzywych energii potencjalnej cząsteczek dwuatomowych w metodzie HF. Wyznaczanie i interpretacja diagramów orbitali molekularnych i diagramów Walsh.	2
Rf9	Metoda oddziaływania konfiguracji. Obliczenia widm stanów elektronowych metodą oddziaływania konfiguracji z pojedynczymi (CIS) i podwójnymi wzbudzeniami (CISD). Badanie ekstensywności i spójności rozmiarowej metody CI. Projekt I. Obliczenia widm stanów elektronowych i ich interpretacja dla wybranych cząsteczek wieloatomowych.	2
Rf10	Dokładność metod chemii obliczeniowej. Wybór bazy funkcyjnej. Porównanie dokładności wybranych metod ab initio i teorii funkcjonału gęstości. Walidacja metod obliczeniowych.	2
Rf11	Przewidywanie i interpretacja widm absorpcji i fluorescencji w zakresie UV-vis. Interpretacja charakteru stanów wzbudzonych elektronowo. Naturalne orbitale przejścia. Badanie powierzchni energii potencjalnej w stanach wzbudzonych elektronowo.	2
Rf12	Projekt II. Wyznaczanie struktury subtelnej widm absorpcji i fluorescencji w ramach modelu liniowego sprzężenia w modelowych układach.	2
Rf13	Poszukiwanie i charakterystyka szwów przecięć stanów elektronowych i ich minimów. Teoretyczne metody lokalizacji minimów energii przecięć stanów elektronowych. Przecięcia stożkowe i przejścia międzysystemowe. Wyznaczanie widm absorpcji przejściowej.	2
Rf14	Projekt III. Wyznaczanie kanałów bezpromienistej dezaktywacji w modelowych układach.	2
Rf15	Prezentacje wyników projektów I-III	2
	Suma godzin	30

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

- N1. Wykład przy tablicy
- N2. Prezentacja multimedialna
- N3. Realizacja zadań/projektów w pracowni komputerowej
- N4. Komputery osobiste / zasoby centrum obliczeniowego / specjalistyczne oprogramowanie

OSIĄGANE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Rodzaj efektu uczenia się	Kod składnika opisu efektu uczenia się	Sposób weryfikacji
Umiejętności	P8S_UW	raport
Umiejętności	P8S_UO	raport
Kompetencje społeczne	P8S_KO	prezentacja
Kompetencje społeczne	P8S_KR	prezentacja

LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA

LITERATURA PODSTAWOWA:

- [1] R. W. Góra, Materiały do interdyscyplinarnego kursu dydaktycznego: "Teoretyczne metody badania fotochemii i fotofizyki układów molekularnych", 2019
- [2] L. Piela, Idee Chemii Kwantowej, PWN, Warszawa, 2010.
- [3] K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia Fizyczna (cz. 2), PWN, Warszawa, 2005.
- [4] D. O. Hayward, Mechanika Kwantowa dla Chemików, PWN, Warszawa, 2007.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

- [1] Engel, T., Reid, P., Quantum Chemistry and Spectroscopy, 3rd ed. ed. Pearson, Boston, 2013.
- [2] Olivucci, M. (Ed.), Computational Photochemistry, 1st ed., Theoretical and computational chemistry. Elsevier, Amsterdam ; Boston, 2005.
- [3] May, V., Kühn, O., Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems, 3rd ed. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011.

OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)

Robert W. Góra, robert.gora@pwr.edu.pl