

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 ~~pol~~skim / angielskim*

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

Kod przedmiotu: NCQ100167W

* zaznaczyć właściwe

	Wykład autorski	Lektorat	Seminarium	Różne formy
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	30	-	-	
Forma zaliczenia – na ocenę	Egzamin	-	-	
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 nieadiabatycznych 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.

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ

TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć – wykład autorski (Wa)		Liczba godzin
Wa1	Wprowadzenie do molekularnej mechaniki kwantowej. Omówienie postulatów nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. Definicja funkcji falowej i jej probabilistyczna interpretacja. Definicja operatorów reprezentujących wielkości mechaniczne i elementy algebry operatorów. Równanie Schrödingera zależne i niezależne od czasu.	2
Wa2	Przybliżone metody rozwiązywania równania Schrödingera I. Rachunek wariacyjny i jego proste zastosowania. Metoda Rayleigha-Ritza.	2
Wa3	Przybliżone metody rozwiązywania równania Schrödingera II. Teoria orbitali molekularnych. Metoda Hückela i przykłady jej zastosowania.	2
Wa4	Przybliżone metody rozwiązywania równania Schrödingera III. Rachunek zaburzeń niezależny od czasu. Zaburzenie w układzie dwustanowym i wielostanowym. Rachunek zaburzeń dla zwyrodniałych stanów referencyjnych.	2
Wa5	Funkcje falowe dla układów wieloelektronowych. Symetria funkcji falowej. Wyznacznikowa funkcja falowa. Reguły Slatera-Condona. Ogólne wyrażenia na elementy macierzowe pomiędzy wyznacznikami Slatera.	2
Wa6	Metoda Hartree-Focka. Metoda pola samouzgodnionego. Metoda Hartree-Focka-Roothana. Gęstość ładunku i elementy macierzowe operatora Focka.	2
Wa7	Hamiltonian molekularny. Rozdzielenie ruchu elektronów i jąder atomowych. Przybliżenie adiabatyczne i przybliżenie Borna-Oppenheimera. Przybliżenie harmoniczne. Analiza drgań normalnych i interpretacja widm absorpcyjnych w zakresie podczerwieni.	2
Wa8	Orbitale molekularne. Elementy teorii grup punktowych. Symetria i nomenklatura orbitali molekularnych. Diagramy orbitali molekularnych dla cząsteczek dwuatomowych i wieloatomowych. Diagramy Walsha.	2
Wa9	Korelacja elektronowa I. Ograniczenia metody Hartree-Focka. Definicja i metody wyznaczania korelacji elektronowej. Metoda oddziaływania konfiguracji.	2
Wa10	Korelacja elektronowa II. Rachunek zaburzeń Møllera-Plesseta. Elementy teorii sprzężonych klastrów.	2
Wa11	Teoria funkcjonalu gęstości. Jednocząstkowa macierz gęstości i macierz gęstości par. Twierdzenia Hohenberga-Kohna. Metoda Kohna-Shama.	2
Wa12	Oddziaływanie materii z promieniowaniem elektromagnetycznym. Los cząsteczek w stanach wzbudzonych elektronowo. Fotochemiczne i fotofizyczne procesy w układach molekularnych. Diagram Jabłońskiego.	2
Wa13	Widma absorpcji i fluorescencji w zakresie UV i widzialnym. Złota reguła Fermiego. Reguły wyboru. Struktura subtelna widm absorpcji i fluorescencji.	2
Wa14	Procesy bezpromienistej dezaktywacji stanów wzbudzonych. Konwersja wewnętrzna. Przecięcia stożkowe. Przejścia międzysystemowe. Transfer energii wzbudzenia - mechanizmy Förstera i Dexter. Naturalne i sztuczne układy przechwytyjące światło. Fotosynteza.	2
Wa15	Teoretyczne i eksperymentalne metody badania właściwości fotochemicznych i fotofizycznych układów molekularnych. Dynamika nieadiabatyczna. Widma absorpcji przejściowej i ich interpretacja.	2
	Suma godzin	30

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

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
Wykład	P8U_W	egzamin
Wykład	P8S_WG	egzamin
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. Pielą, 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

