

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ

PRACOWNIK/ZESPÓŁ ZGŁASZAJĄCY/REALIZUJĄCY KURS: Szczepan Roszak
JEDNOSTKA ZGŁASZAJĄCA KURS: Wydział Chemiczny
DYSCYPLINA: Nauki Chemiczne

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa w języku polskim: Chemia Teoretyczna i Obliczeniowa

Nazwa w języku angielskim: **Theoretical and computational chemistry**

Kurs prowadzony jest w języku polskim / angielskim*

Kurs przeznaczony dla wszystkich doktorantów: **TAK / NIE**

1) KURS PODSTAWOWY

2) KURS SPECJALISTYCZNY

3) SEMINARIUM

4) KURS HUMANISTYCZNY

5) LEKTORAT

Kod przedmiotu: **NCQ100106W**

* zaznaczyć właściwe

	Wykład autorski	Lektorat	Seminarium	Różne formy
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	30			
Forma zaliczenia – na ocenę	<u>Egzamin</u>	Egzamin	Wygłoszenie referatu	Egzamin, hospitacje, zajęcia ewaluacyjne
Liczba punktów ECTS	0			

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1. Podstawowa wiedza z fizyki i nauk chemicznych

CELE PRZEDMIOTU

C1 Uczestnik kursu poznaje podstawy chemii kwantowej oraz nabywa umiejętność jej praktycznego stosowania.

C2 Przedmiot daje umiejętność teoretycznego wyznaczenia właściwości cząsteczek, kompleksów molekularnych, materiałów, a także modelowania procesów chemicznych.

C3 Przedmiot pozwala rozpoznać możliwości zastosowania i pożytek z wykorzystania chemii teoretycznej w dziedzinie wykonywania badań własnych doktoranta.

TREŚCI PROGRAMOWE

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

Forma zajęć – wykład autorski (Wa)		Liczba godzin
Wa1	Podstawowe pojęcia i postulaty mechaniki kwantowej	2
Wa2	Krzywe energii potencjalnej –mechanika molekularna, termodynamika chemiczna	2
Wa3	Proste problemy modelowe, bariera potencjału, wiązanie wodorowe, oscylator harmoniczny –spektroskopia w podczerwieni, kwantowanie energii ruchu obrotowego –spektroskopia mikrofalowa	4
Wa4	Atom wodoru, spektroskopia atomu wodoru	2
Wa5	Metoda wariacyjna, przybliżenie orbitalne, funkcja wyznacznikowa	2
Wa6	Struktura atomów wieloelektronowych, układ okresowy pierwiastków	2
Wa7	Metody Hartree -Fock oraz Hartree-Focka-Roothaana	4
Wa8	Warianty metod ab initio, bazy funkcyjne	2
Wa9	Wiązanie chemiczne –analiza populacyjna	2
Wa10	Rachunek zaburzeń, oddziaływania molekularne	2
Wa11	Korelacja elektronowa, perspektywy chemii obliczeniowej	4
Wa12	Dostępne programy komputerowe oraz strony www, oprogramowanie w WCSS, PCSS i ICM.	2
	Suma godzin	30

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1.Wykład
N2.Dyskusja naukowa z uczestnikami wykładu

OSIĄGANE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Rodzaj efektu uczenia się	Kod składnika opisu efektu uczenia się	Sposób weryfikacji
Wiedza	P8U_W	kompetentnie cytuje innych autorów w opublikowanych i przygotowywanych do publikacji artykułach w recenzowanych czasopismach naukowych, w recenzowanych materiałach z międzynarodowych konferencji naukowych, w wydaniach książkowych, poprzedzających przygotowanie rozprawy doktorskiej
Wiedza	P8S_WG	ma wiedzę na zaawansowanym poziomie w odniesieniu do dyscypliny i tematyki związanej z obszarem prowadzonych badań naukowych, obejmującą najnowsze wyniki badań i osiągnięcia nauki
Umiejętności	P8S_UW	ma umiejętności naukowe i technologiczne związane z metodyką i metodologią prowadzenia badań naukowych oraz krytyczną oceną otrzymanywanych rezultatów

SZKOŁA DOKTORSKA POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

		- potrafi kreować i prowadzić samodzielne badania naukowe, w tym także poza jednostką prowadzącą kształcenie - umie twórczo interpretować uzyskane wyniki oraz
Kompetencje społeczne	P8U_K	potrafi przygotować i przedstawić prezentację ustną i multimedialną w języku angielskim na temat realizacji badań oraz poprowadzić dyskusję dotyczącą przedstawionej prezentacji

LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA

LITERATURA PODSTAWOWA:

- [1] Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry, M. A. Ratner, G. C. Schatz, Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 2000
[2] Exploring Chemistry with Electronic Structure Theory, J. B. Foresman, A. Frish, Gaussian Inc., Pittsburgh, 1995.
[3] Ab Initio Molecular Orbital Theory, W. J. Hehre, L. Radom, P. v R. Schleyer, J. A. Pople, Wiley, New York, 1996.
[4] Idee Chemii Kwantowej, L. Piela, PWN, Warszawa, 2012.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

- [1] Aktualne publikacje w czasopismach naukowych.
[2] Theoretical and Computational Chemistry –lectures, S. Roszak, Wydz. Chemiczny, Politechnika Wrocławska, 2011.
[3] Theoretical and Computational Chemistry –laboratory, S. Roszak, Wydz. Chemiczny, Politechnika Wrocławska, 2011.

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

Szczepan Roszak, Szczepan.roszak@pwr.edu.pl