

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład monograficzny - Wprowadzenie do kwantowej chemii komputerowej (Wykład), PG_00080897						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
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		5.0		40.0	75
Cel przedmiotu	Przygotowanie studentów do doboru właściwej metody chemii komputerowej do analizy specyficznego problemu chemicznego, zaprojektowania algorytmu obliczeniowego zapewniającego możliwie szybkie rozwiązanie problemu oraz oceny dokładności uzyskanego rezultatu numerycznego.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BCHMU2_W01] Zna i rozumie w pogłębiony sposób złożone procesy fizykochemiczne oraz potrafi analizować ich przebieg w powiązaniu z innymi dziedzinami nauki.	Dysponuje wiedzą na temat kierunków rozwoju i zastosowania chemii komputerowej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHMU2_U02] Potrafi określić swoje zainteresowania, rozwijać je w ramach wybranego kierunku i w powiązaniu z tematyką pracy magisterskiej realizując proces samokształcenia i planowania swojej kariery zawodowej.	Ma świadomość swojej wiedzy i umiejętności, rozumie potrzebę ciągłego dokształcania zawodowego i rozwoju osobistego, dokonuje samooceny własnych kompetencji i doskonali umiejętności, wyznacza kierunki własnego rozwoju u kształcenia.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHMU2_U01] Potrafi, w oparciu o posiadaną wiedzę zaproponować rozwiązanie problemów z chemii z uwzględnieniem aspektu ekonomicznego przy zastosowaniu zaawansowanych technik pomiarowych i analitycznych.	Proponuje rozwiązania problemów fotochemicznych przy pomocy wiedzy nabytej w trakcie wykładu.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHMU2_K04] Jest gotów do właściwej oceny zdobytej wiedzy, jej poszanowania i rozpowszechniania w celu rozwiązywania określonych zagadnień poznawczych i praktycznych.	Zachowuje ostrożność i krytycyzm w wyrażaniu opinii.	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
[BCHMU2_W05] Zna i rozumie główne kierunki rozwoju chemii w połączeniu z ekonomią jako dwiema przenikającymi się dyscyplinami naukowymi.	Dysponuje wiedzą na temat kierunków rozwoju i zastosowania chemii komputerowej..	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	Przybliżenie Borna-Oppenheimera, równanie Schrödingera niezależne od czasu. przybliżenie jednoelektronowe, wyznacznik Sla-tera, metoda Hartree-Focka (HF) i Hartree-Focka-Roothana (HFR), półempiryczne schematy metody HFR: CNDO, INDO, ND-DO, 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 klastrów (CC). Metody funkcjonału gęstości (DFT). Zastosowania metody HFR oraz metod skorelowanych: dobór bazy funkcyjnej, optymalizacja geometrii molekuly, wyznaczanie entalpii reakcji. harmonicznych modów normalnych (widmo IR), przesunięć NMR oraz widm elektronowych układu molekularnego.		
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
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. Lucjan Piela Idee chemii kwantowej, PWN 2003. 2. Frank Jensen Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2006. 3. Christopher J. Cramer Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley, 2004. 	
	Uzupelniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. 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"> 1. Założenia i przybliżenia metody HF. 2. Typy baz funkcyjnych stosowanych w obliczeniach kwantowochemicznych ich zalety i ograniczenia. 3. Co to są funkcje dyfuzyjne? Jaki jest mechanizm ich działania i kiedy się je stosuje? 4. Co to jest przybliżenie ZDO i jakie ma ono znaczenie dla metod półempirycznych? 5. Opisz krótko idee metod DFT. 		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.