

<b>WYDZIAŁ PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI</b>	
<b>KARTA PRZEDMIOTU</b>	
<b>Nazwa przedmiotu w języku polskim: Elementy chemii kwantowej</b>	
<b>Nazwa przedmiotu w języku angielskim: Elements of quantum chemistry</b>	
<b>Kierunek studiów (jeśli dotyczy): Fizyka Techniczna</b>	
<b>Specjalność (jeśli dotyczy): Nanoinżynieria</b>	
<b>Poziom i forma studiów: II stopień, stacjonarna</b>	
<b>Rodzaj przedmiotu:</b>	<b>wybieralny</b>
<b>Kod przedmiotu</b>	.....
<b>Grupa kursów</b>	<b>TAK</b>

	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	15		15		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	45		45		
Forma zaliczenia	Egzamin/ zaliczenie na ocenę*		Egzamin/ zaliczenie na ocenę*		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)	X				
Liczba punktów ECTS	3				
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			2		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego udziału nauczycieli lub innych osób prowadzących zajęcia (BU)	0.5		1.0		

\*niepotrzebne skreślić

<b>WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH</b>
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Znajomość Analizy matematycznej i Algebry liniowej.</li> <li>2. Znajomość fizyki na poziomie kursu Fizyka I.</li> <li>3.</li> </ol>

<b>CELE PRZEDMIOTU</b>
<ol style="list-style-type: none"> <li>C1. Zapoznanie z wybranymi technikami chemii kwantowej i modelowania molekularnego.</li> <li>C2. Nauczenie posługiwania się przykładowym programem do obliczeń kwantowo-chemicznych.</li> <li>C3. Nabycie umiejętności poprawnego przewidywania właściwości materii na podstawie analizy</li> </ol>

otrzymanych danych kwantowo-chemicznych.

### PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Z zakresu wiedzy:

PEU\_W01 – posiada znajomość metod Hartree-Focka oraz DFT wraz ze stosowanymi założeniami i przybliżeniami

PEU\_W02 – posiada znajomość empirycznych metod stosowanych w chemii obliczeniowej

PEU\_W03 – posiada wiedzę na temat metody dynamiki molekularnej (klasycznej)

PEU\_W04 – posiada wiedzę na temat metody dynamiki molekularnej ab initio

...

PEU\_U01 – potrafi posługiwać się wybranym programem do obliczeń kwantowo-chemicznych

PEU\_U02 – potrafi posługiwać się wybranym programem do klasycznej dynamiki molekularnej

PEU\_U03 – potrafi posługiwać się wybranym programem do dynamiki molekularnej ab initio.

...

PEU\_K01 – rozumie potrzebę formułowania i przekazywania społeczeństwu (m.in. poprzez środki masowego przekazu) informacji i opinii dotyczących nanoinżynierii; potrafi przekazać takie informacje w sposób powszechnie zrozumiały

### TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć - wykład		Liczba godzin
Wy1	Wprowadzenie do przedmiotu – cele i zastosowania chemii obliczeniowej; organizacja zajęć.	2
Wy2	Podstawy chemii kwantowej. Równanie Schroedingera niezależne od czasu, przybliżenie adiabatyczne i BO.	2
Wy3	Metoda Hartree-Focka: metoda LCAO, wyznacznik Slatera, bazy funkcyjne.	2
Wy4	Metody DFT.	2
Wy5	Potencjały empiryczne stosowane w chemii obliczeniowej; przybliżenia i algorytmy.	2
Wy6	Metoda dynamiki molekularnej; implementacja zespołów statystycznych, algorytmy.	2
Wy7	Zastosowania dynamiki molekularnej.	2
Wy8	Kolokwium zaliczeniowe.	1
	Suma godzin	<b>15</b>

<b>Forma zajęć - laboratorium</b>		<b>Liczba godzin</b>
La1	Sposób prowadzenia i zaliczenia laboratorium. Nauka poleceń systemu Linux.	2
La2 La3	Obliczenia kwantowo-chemiczne struktury i własności prostych cząsteczek.	4
La4 La5	Symulacje klasyczną metodą dynamiki molekularnej.	4
La6 La7	Symulacje metodą dynamiki molekularnej Car-Parrinello lub Born-Oppenheimer MD.	4
La8	Projekt zaliczeniowy	1
	Suma godzin	15

<b>STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE</b>
N1. wykład z prezentacją multimedialną N2. wykorzystanie gotowego oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych. N3. opracowanie projektu końcowego.

#### **OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ**

<b>Oceny</b> (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
P (wykład)	PEU_W01- PEU_W04	Kolokwium zaliczeniowe
P (laboratorium)	PEU_U01- PEU_U03	Projekt
$P = F1*0.5+F2*0.5$		

<b>LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA</b>
<b><u>LITERATURA PODSTAWOWA:</u></b> [1] L. Pielą "Idee chemii kwantowej", wyd. PWN [2] A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera "Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym" Wydawnictwo Naukowe Mikołaja Kopernika [3] D. Heermann "Podstawy symulacji komputerowych w fizyce", wyd. WNT [4] James B. Foresman and Aileen Frish "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian" Gaussian, Inc
<b><u>LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:</u></b> [1] I. N. Levine "Quantum chemistry", wyd. Prentice Hall [2] D. Frenkel, B. Smit "Understanding Molecular Simulation", wyd. Academic Press [3] C.J. Cramer "Essentials of Computational Chemistry", Willey
<b>OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIĘ, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)</b>

Paweł Lipkowski pawel.lipkowski@pwr.edu.pl