

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Theoretical chemistry</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	materials chemistry
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	konwersatorium - dr Mariusz Barczak
Rok/Semestr:	I/1
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	<b>Barczak Mariusz, dr</b>
Forma zajęć:	konwersatorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Wstępne wymagania:	Basic knowledge of mathematical analysis, physics and classical thermodynamics. Finished basic course of theoretical chemistry.
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"><li>• dyskusja dydaktyczna</li><li>• klasyczna metoda problemowa</li><li>• objaśnienie lub wyjaśnienie</li><li>• opis</li><li>• opowiadanie</li><li>• seminarium</li></ul>
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Postulates of statistical thermodynamics.</li><li>2. Maxwell-Boltzmann distribution law. <math>C</math> and <math>\beta</math> constants in Maxwell-Boltzmann distribution law.</li><li>3. Basic concepts of statistical quantum mechanics. The number of quantum-mechanical states for bosons and fermions. The number of quantum-mechanical states in the case of distinguishable particles. The comparison of three statistics.</li><li>4. Microcanonical, canonical and grand-canonical ensemble and their applications. Thermodynamic equivalence of ensembles</li><li>5. Quantum mechanical principles, basic systems (particularly hydrogen-like atom), variational and perturbational approximation methods.</li><li>6. One Electron Approximation and the Hartree-Fock method.</li><li>7. Electron Correlation, Post Hartree-Fock Methods (Moller-Plesset MP2, MP3, MP4, Configuration Interaction CI).</li><li>8. Geometry Optimization. Potential Energy Surface. Simulation of the IR and NMR spectra.</li></ol>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"><li>• końcowe zaliczenie pisemne</li><li>• ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)</li><li>• śródsesemestralne pisemne testy kontrolne</li></ul>
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"><li>1. T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics.</li><li>2. A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern quantum chemistry, introduction to advanced electronic structure theory.</li><li>3. D.B. Cook, Handbook of computational chemistry.</li><li>4. L. Pielą, Idee chemii kwantowej</li></ol>