

## 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:	laboratorium- dr Mariusz Barczak
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	<b>Barczak Mariusz, dr</b>
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	zaawansowany
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>• ćwiczenia laboratoryjne</li> <li>• metoda projektów</li> <li>• objaśnienie lub wyjaśnienie</li> <li>• opis</li> <li>• z użyciem komputera</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>• ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne</li> <li>• dokumentacja realizacji projektu</li> <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>