

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Theoretical chemistry
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	materials chemistry
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	konwersatorium - dr Mariusz Barczak
Rok/Semestr:	I/1
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	Barczak Mariusz, dr
Forma zajęć:	konwersatorium
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"> • dyskusja dydaktyczna • klasyczna metoda problemowa • objaśnienie lub wyjaśnienie • opis • opowiadanie • seminarium
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Postulates of statistical thermodynamics. 2. Maxwell-Boltzmann distribution law. C and β constants in Maxwell-Boltzmann distribution law. 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. 4. Microcanonical, canonical and grand-canonical ensemble and their applications. Thermodynamic equivalence of ensembles 5. Quantum mechanical principles, basic systems (particularly hydrogen-like atom), variational and perturbational approximation methods. 6. One Electron Approximation and the Hartree-Fock method. 7. Electron Correlation, Post Hartree-Fock Methods (Moller-Plesset MP2, MP3, MP4, Configuration Interaction CI). 8. Geometry Optimization. Potential Energy Surface. Simulation of the IR and NMR spectra.
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> • końcowe zaliczenie pisemne • ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność) • śródsemestralne pisemne testy kontrolne
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> 1. T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics. 2. A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern quantum chemistry, introduction to advanced electronic structure theory. 3. D.B. Cook, Handbook of computational chemistry. 4. L. Piel, Idee chemii kwantowej