

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Theoretical chemistry	
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014	
Specjalność:	materials chemistry	
Rok/Semestr:	I/2	
Liczba godzin:	30,0	
Nauczyciel:	Woliński Krzysztof, prof. dr hab.	
Forma zajęć:	wykład	
Rodzaj zaliczenia:	egzamin	
Punkty ECTS:	6,0	
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu	
Metody dydaktyczne:	• konsultacje • objaśnienie lub wyjaśnienie • wykład konwersatoryjny • z użyciem komputera	
Zakres tematów:	1. Równanie Schrodingera zależne i niezależne od czasu. Funkcja falowa i gęstość prawdopodobieństwa dla stanów stacjonarnych. 2. Układy wieloelektronowe. Hamiltonian dla molekuly. Możliwości dokładnego rozwiązania równania Schrodingera dla molekuly. 3. Dwa podstawowe przybliżenia chemii kwantowej prowadzące do metody Hartree-Focka (HF). 4. Praktyczna realizacja obliczeń metodą Hartree-Focka. Przybliżenie Roothaana, baza funkcyjna i metoda Hartree-Fock-Roothaana (HFR) (dla stanów zamknięto-powłokowych). 5. Numeryczne aspekty obliczeń metodą Hartree-Fock-Roothaana (HFR). 6. Zastosowanie metody HFR do obliczeń własności molekularnych. Moment dipolowy, gęstość ładunku i analiza populacyjna. 7. Korelacja elektronowa i metody jej uwzględniania (CI i MP2) 8. Obliczenia magnetycznych stałych ekranowania jąder (spektroskopia NMR), stałych siłowych (Hessian; spektroskopia IR) i symulacja eksperymentu AFM.	
Forma oceniania:	• egzamin pisemny	