

(pieczęć jednostki organizacyjnej)

KARTA PRZEDMIOTU

1) Nazwa przedmiotu: CHEMIA TEORETYCZNA		2) Kod przedmiotu:		
3) Karta przedmiotu ważna od roku akademickiego: 2018/2019				
4) Forma kształcenia: studia stacjonarne				
5) Poziom kształcenia: STUDIA PIERWSZEGO STOPNIA				
6) Kierunek studiów: CHEMIA				
7) Profil studiów: ogólnoakademicki				
8) Specjalność: WSZYSTKIE SPECJALNOŚCI				
9) Semestr: V				
10) Jednostka prowadząca przedmiot: Katedra Chemii Organicznej Bioorganicznej i Biotechnologii				
11) Prowadzący przedmiot: dr hab. inż. Wojciech Szczepankiewicz				
12) Przynależność do grupy przedmiotów: kierunkowych				
13) Status przedmiotu: obowiązkowy				
14) Język prowadzenia zajęć: polski				
15) Przedmioty wprowadzające oraz wymagania wstępne: matematyka, fizyka, chemia ogólna i nieorganiczna, chemia organiczna.				
16) Cel przedmiotu: Wykazanie, że badanie niektórych właściwości atomów i cząsteczek i ich zbiorów jest możliwe z zastosowaniem narzędzi obliczeniowych (głównie komputerowych) w zastępstwie eksperymentu. Studenci zdobędą wiedzę i umiejętności w zakresie konstrukcji hamiltonianów dla niezależnego od czasu równania Schrödingera dla atomu wodoru i innych prostych układów kwantowych, wykażą umiejętność obrazowania i analizy geometrii molekuł z wykorzystaniem wybranych programów komputerowych, wykażą umiejętność przeprowadzenia i analizy wyników obliczeń kwantowo-chemicznych w obszarze metod półempirycznych, będą zdolni do ekstrapolacji zdobytej wiedzy i umiejętności na obszary szczegółowe związane z np. wykonywaniem części obliczeniowej projektu inżynierskiego.				
17) Efekty kształcenia: ¹				
Nr	Opis efektu kształcenia	Metoda sprawdzenia efektu kształcenia	Forma prowadzenia zajęć	Odniesienie do efektów dla kierunku studiów
1.	Ma wiedzę o miejscu chemii teoretycznej w systemie nauk chemicznych	Sprawozdanie	Wykład	K_W01(+)

¹ należy wskazać ok. 5 – 8 efektów kształcenia

2.	Ma wiedzę o formułowaniu zagadnień związanych ze stacjonarnym równaniem Schrödingera	Sprawozdanie	Wykład	KW11(+++)
3.	Ma wiedzę o zakresie stosowalności programu MOPAC	Sprawozdanie	Wykład/ ćwiczenia	K_W12(++) KU_15(+++)
4.	Umie przekształcić klasyczne zagadnienie energii całkowitej układu na zapis operatorowy	Sprawozdanie	Wykład/ ćwiczenia	K_U13(++) K_U14(+++)
5.	Potrafi zapisać parametry geometryczne cząsteczek za pomocą współrzędnych wewnętrznych i kartezyjskich i odtworzyć je na ekranie monitora z wykorzystaniem programu MOPAC	Sprawozdanie	Wykład/ ćwiczenia	K_U15(+++)
	Potrafi pracować w grupie nad określaniem parametrów geometrycznych zadanej cząsteczki	Sprawozdanie	Wykład/ ćwiczenia	K_K02(++)

18) Formy zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)

Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
30 godzin	-	15 godzin	-	-

Treści kształcenia: (oddzielnie dla każdej z form zajęć dydaktycznych W./Ćw./L./P./Sem.)

Wykład:

Źródła teorii chemii w ujęciu kwantowym i historycznym. [2 godziny]

Widmo ciała doskonale czarnego i stała Plancka, kwantowanie energii w odniesieniu do atomu wodoru, widmo dyskretne, koncepcja planetarnego atomu wodoru, orbity stacjonarne, rewolucja kwantowa, probabilistyczny model atomu wodoru, funkcje gęstości prawdopodobieństwa, historia obliczania energii cząsteczki wodoru – od funkcji Heitlera-Londona do funkcji Kołosa-Wolniewicza, miejsce i zakres stosowania metod kwantowych we współczesnej chemii.

Obrazowanie atomów i molekuł. [2 godziny]

Cele eleganckiego przedstawiania modeli molekularnych, układ współrzędnych kartezyjskich a układ współrzędnych wewnętrznych, źródła informacji o długościach wiązań i kątach w cząsteczkach chemicznych, formaty zapisu współrzędnych dla potrzeb programów obliczeniowych chemii kwantowej, konstruowanie geometrii wybranych modeli cząsteczek chemicznych, wybrane programy do generowania obrazów molekuł.

Zasada nieoznaczoności. [2 godziny]

Źródło zasad nieoznaczoności, sformułowanie pędowo – położeniowe oraz czasowo – energetyczne zasady nieoznaczoności Heisenberga, tzw. eksperyment mikroskopowy, spektroskopowy wyraz zasady nieoznaczoności, doświadczenie dyfrakcyjne Younga.

Modele atomu wodoru i atomów wodoropodobnych. [2 godziny]

Przedkwantowe wyobrażenia atomów, model Bohra i stany bezpromieniste, funkcja falowa - własności i jej probabilistyczna interpretacja według Borna, normowanie, model probabilistyczny atomu wodoru, gęstość elektronowa w atomie wodoru, funkcja elektronowej dystrybucji radialnej, makroskopowe modele gęstości elektronowej.

Energia układu mikroskopowego w ujęciu kwantowym. [2 godziny]

Klasyczny zapis energii całkowitej układu na przykładzie atomu wodoru, reguły Jordana zamiany zapisu energii kinetycznej i potencjalnej na zapis operatorowy, operatory Laplace'a i Hamiltona, konstrukcja hamiltonianów w prostokątnym układzie współrzędnych dla prostych układów kwantowych.

Równanie Schrödingera – podstawowe narzędzie chemii kwantowej. [2 godziny]

Równanie Schrödingera zależne od czasu, Równanie Schrödingera niezależne od czasu, stany stacjonarne, stosunek Rayleigha jako wyrażenie na wartość średnią energii stanu stacjonarnego, wartości średnie innych operatorów kwantowo-mechanicznych.

Energia stanu podstawowego atomu wodoru i atomów wodoropodobnych. [2 godziny]

Schemat procedury: przybliżenie nieruchomego jądra, wybór próbnej funkcji falowej, działanie hamiltonianu na funkcję falową w prostokątnym układzie współrzędnych, zmiana prostokątnego układu współrzędnych na sferyczny, jacobian przekształcenia, zastosowanie całki potrójnej do obliczenia postaci funkcjonału energii, minimalizacja

wartości funkcjonału, funkcja Gaussa, jako przykład przybliżonej funkcji falowej stanu stacjonarnego atomu wodoru.

Orbitale atomowe i molekularne. [2 godziny]

Postacie matematyczne orbitali wzbudzonych atomu wodoru i wodoropodobnych, obrazowanie części kątowych orbitali, hybrydyzacja jako jednocentrowa kombinacja liniowa orbitali atomowych, dwucentrowa kombinacja liniowa orbitali s i p, jako model wiązań sigma i pi.

Elementy rachunku macierzowego w chemii. Zagadnienie własne i optymalizacja. [2 godziny]

Repetitorium rachunku macierzowego, iloczyn skalarny i wektorowy wektorów, mnożenie macierzy przez wektor, macierzy przez macierz, nieprzemienność mnożenia, macierzowy zapis układu równań liniowych, transformacje macierzy: odwracanie, diagonalizacja, zagadnienie własne w ujęciu macierzowym, wartości i wektory własne macierzy, komputery w operacjach macierzowych, zarys metod optymalizacyjnych.

Wstęp do obliczeniowych metod chemii kwantowej. [3 godziny]

Podstawy teoretyczne półempirycznych metod chemii kwantowej, zakres przybliżeń, przybliżenie jednoelektronowe, baza funkcyjna orbitali atomowych, funkcje typu Slatera, zarys metody Hartree-Focka, pole samouzgodnione.

Metody półempiryczne w praktyce. [3 godziny]

Komputerowe narzędzia do przybliżonego określania geometrii i właściwości elektronowych prostych cząsteczek chemicznych w stanie podstawowym, program MOPAC, formaty danych wejściowych i wyników, procedury optymalizacyjne, precyzja obliczeń, znajdowanie minimum globalnego, stany cząsteczek w próżni i w rozpuszczalniku, analiza populacji elektronowej, orbitale graniczne, określanie niektórych parametrów molekularnych i termodynamicznych, pole sił, stany energetyczne konformacji cząsteczek.

Proste reakcje chemiczne w świetle metod półempirycznych. [3 godziny]

Symulacja zderzeń cząsteczkowych, pojęcie ścieżki reakcji i parametru ścieżki reakcji, określanie geometrii stanu przejściowego za pomocą procedur SADDLE i TS, granice stosowalności metod półempirycznych. Programy do obliczeń kwantowo-chemicznych na poziomie półempirycznym, ab initio i DFT.

Zarys zaawansowanych metod chemii kwantowej. [3 godziny]

Korelacja elektronowa, warianty metody mieszania konfiguracji, metody obliczeniowe *ab initio*, bazy funkcyjne, aproksymacje orbitali Slatera za pomocą funkcji Gaussa, omówienie zarysu metody funkcjonału gęstości, praktyczne realizacje obliczeń metodą DFT, program GAUSSIAN.

Laboratorium: Siedem pracowni dwugodzinnych, jedno jednogodzinne:

Lab. 1: Wstęp i repetytorium z właściwości korpuskularno-falowych i kwantowych materii. [1 godzina]

Przeliczanie jednostek używanych w fizyce molekularnej na wielkości SI i odwrotnie, obliczanie mas i rozmiarów cząsteczek, obliczanie długości fali stowarzyszonej z elektronem o określonej prędkości, szkicowanie wykresów funkcji eksponentyjalnych, gaussowskich oraz ich kwadratów. Podział na grupy zadaniowe.

Lab. 2: Współrzędne wewnętrzne. [2 godziny]

Konstrukcja zbiorów współrzędnych wewnętrznych dla wybranych, prostych molekuł oraz fragmentów sieci krystalicznych: cząsteczka wodoru, wody, nadtlenu wodoru, benzenu, metanu, etanu, 1,2-dichloroetanu (z uwzględnieniem konformacji – rola kątów dwuściennych - torsyjnych), cykloheksanu, komórka elementarna chlorku sodu.

Lab. 3. Praca w grupach dwuosobowych. Tworzenie zbioru współrzędnych wewnętrznych dla zadanej przez prowadzącego cząsteczki chemicznej. [2 godziny]

Konstrukcja zbioru współrzędnych wewnętrznych na podstawie zadanych parametrów geometrycznych cząsteczki. Określanie kątów torsyjnych w zadanym fragmencie cząsteczki. Treść sprawozdania 1.

Lab. 4. Technika obliczania właściwości cząsteczek chemicznych z wykorzystaniem programu MOPAC 1. [2 godziny]

Wprowadzanie zbiorów współrzędnych do programu. Wybór metody optymalizacji i metody półempiryczne do obliczeń. Analiza zbiorów wynikowych z uwzględnieniem optymalnej geometrii, ładunków cząstkowych na atomach, rzędu wiązania, ciepła tworzenia oraz momentu dipolowego.

Lab. 5. Technika obliczania właściwości cząsteczek chemicznych z wykorzystaniem programu MOPAC 2. [2

godziny]

Określanie właściwości szeregów cząsteczek podobnych za pomocą metod półempirycznych. Badanie wpływu podstawników na gęstość elektronową pierścienia benzenowego w szeregu wybranych pochodnych benzenu. Potencjał jonizacji, znaczenie wartości orbitali HOMO i LUMO. Współczynniki rozwinięcia kombinacji liniowej orbitali atomowych a poziomy orbitalowi.

Lab. 6. Obliczania właściwości cząsteczek chemicznych z wykorzystaniem programu MOPAC 3. [2 godziny]

Obliczanie ścieżek prostych reakcji chemicznych. Określanie przybliżonych parametrów geometrycznych i energetycznych substratów, stanu przejściowego i produktów.

Lab. 7. Obliczania właściwości cząsteczek chemicznych z wykorzystaniem programu MOPAC 4. [2 godziny]

Określanie właściwości stanu przejściowego prostej reakcji chemicznej z zastosowaniem procedur optymalizacji TS, SIGMA, NLLSQ oraz procedury SADDLE. Badanie znaków wartości własnych hessianu. Procedury IRC. Wizualizacja drgań cząsteczki za pomocą wybranego programu (JMol, GabEdit). Treść sprawozdania 2.

Lab. 8. [2 godziny] Analiza postępów w sprawozdaniu 2. Podsumowanie ćwiczeń.**19) Egzamin: nie****20) Literatura podstawowa:**

1. R. McWeeny, *Coulsona wiązanie chemiczne*, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1987.
2. W. Kołos, J. Sadlej, *Atom i cząsteczka*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1998.
3. W. Kołos, *Chemia kwantowa*, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1986.
4. A. Gołębiewski, *Elementy mechaniki i chemii kwantowej*, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1982.
5. H. Haken, H. C. Wolf, *Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1998.
6. <http://openmopac.net/>
7. Program Raswin: <http://www.bernstein-plus-sons.com/software/rasmol/>
8. <https://www.wolframalpha.com/>
9. Program Maxima: <http://maxima.sourceforge.net/>

21) Literatura uzupełniająca:

1. W. Ufnalski, K. Mądry, *Excel dla chemików... i nie tylko*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 2000.
1. M. Kręglewski, J. Makarewicz, R. Pyżalski, J. Rychlewski, *Zadania z chemii kwantowej*, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1984.

22) Nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów kształcenia

Lp.	Forma zajęć	Liczba godzin kontaktowych / pracy studenta
1.	Wykłady	30/40
2.	Ćwiczenia	-
3.	Laboratorium	15/45
4.	Projekt	-
5.	Seminarium	-
6.	Inne	5/5
Suma godzin:		45/90

23. Suma wszystkich godzin:

90

24. Liczba punktów ECTS:	3
25. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego:	1
26. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach o charakterze praktycznym (laboratoria, projekty, ćwiczenia):	1
27. Uwagi: brak	

Zatwierdzono:

.....
(data i podpis prowadzącego)

.....
(data i podpis Dyrektora/Kierownika podstawowej
lub międzywydziałowej jednostki organizacyjnej)