

Uczelniana Oferta Studiów Zaawansowanych	
SYLABUS 2012/2013	
Nazwa przedmiotu	Chemia – metody kwantowe. Aspekt wielodyscyplinarny
Liczba punktów ECTS <i>Punkty winny być przyporządkowane wszystkim przedmiotom, które kończą się ewaluacją, zgodnie z zasadą, że nakład pracy przeciętnego studenta przypadający na rok akademicki odpowiada 60 punktom ECTS, również w przypadku, gdy przedmioty pogrupowane są w moduły, lub większe „bloki”. Punkty powinny uwzględniać także czas studenta poświęcony na wykonanie takich zadań obowiązujących w ramach zajęć z danego przedmiotu jak prace semestralne/roczne/dyplomowe, dysertacje, projekty/ćwiczenia realizowane w laboratorium, prace terenowe itp.</i>	Proponowana liczba punktów: 3 ECTS

Osoby prowadzące	Tytuł naukowy	Imię i nazwisko	Katedra / Instytut/ Centrum/ Inne
	profesor	Lucjan Piela	Wydział Chemii UW
Osoba odpowiedzialna za przedmiot	profesor	Lucjan Piela	Wydział Chemii UW

Semestr studiów	
Typ przedmiotu (możliwości wyboru) obowiązkowy O fakultatywny F	F
Wymagania wstępne	Student powinien mieć opanowany podstawowy aparat analizy matematycznej (w tym pojęcia pochodnej, różniczkowania, całkowania) oraz podstawowe pojęcia fizyki (głównie mechaniki klasycznej: pęd, energia, moment pędu).
Poziom przedmiotu Podstawowy P Średniozaawansowany Ś Zaawansowany Z	Będzie podjęty wysiłek, aby wszystkie aspekty wykładanego materiału były jasne. Wykład będzie prowadzony interaktywnie (pytania słuchaczy + dyskusja). Zakres materiału będzie odpowiadał lekturze ok.300 stron zalecanej pozycji literaturowej (pośredni między oznaczonymi tam kursami <i>minimum</i> i <i>minimum</i>

Wykład współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



	<i>minimorum</i>).
Charakter zajęć , liczba godzin w semestrze, liczba godzin w tygodniu.	<i>W-30, 2 godziny w tygodniu (W-2)</i>
Sugerowana liczba godzin pracy własnej	60
Całkowita liczba godzin:	90
Aspekty międzynarodowe (jeśli są)	
Język wykładowy	polski
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie doktorantów/słuchaczy – specjalistów w innych dziedzinach ze sposobem opisu układów atomowych i molekularnych przez mechanikę kwantową. Akcent będzie położony na związek tego opisu nie tylko z chemią kwantową, ale także innymi działami chemii (chemia nieorganiczna, organiczna, chemia fizyczna, chemia supramolekularna, spektroskopia), i innymi dziedzinami wiedzy, głównie fizyką, biologią, matematyką, informatyką, teorią informacji i filozofią.
Treść przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Magia mechaniki kwantowej 2. Równanie Schrödingera i jego ścisłe rozwiązania (dla cząstki w pudle, oscylatora harmonicznego, rotatora sztywnego i atomu wodoru). Kluczowa rola tych rozwiązań w interpretacji zjawisk kwantowych, przykład: wykorzystanie do molekuł z aromatycznym układem wiązań (benzen, fulleren, nanorurki) 3. Metoda wariacyjna jako busola prowadząca do przybliżonych stanów kwantowych dowolnego układu 4. Fundamentalny charakter przybliżenia Borna-Oppenheimera („rozdzielenie ruchu jąder i elektronów”): koncepcja “struktury molekuł”, także podstawa interpretacyjna spektroskopii elektronowo-oscylicyjno-rotacyjnej. 5. Ruch jąder: drgania normalne molekuł, pola siłowe i mechanika molekularna. Dynamika molekularna jako uniwersalne narzędzie do modelowania dowolnych procesów molekularnych (od oddziaływania molekuł przez pocisk rozbijający pancierz do mikronarzędzi). 6. Ruch elektronów (struktura elektronowa - wiązania chemiczne): minimalny model molekuły - orbitale molekularne (metoda Hartree-Focka, przybliżenie liniowej kombinacji orbitali atomowych - LCAO, lokalizacja orbitali molekularnych) 7. Poza modelem minimalnym czyli metody obliczeniowe zbliżania się do ścisłego rozwiązania (metoda oddziaływania konfiguracji - CI, metoda funkcjonału gęstości elektronowej - Density Functional Theory) 8. Pochodzenie i rola oddziaływań międzycząsteczkowych. Wstęp do chemii supramolekularnej, zasady działania w skali nano.
Spis zalecanych lektur	

Wykład współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



LP.	Autor, Tytuł, Wydawnictwo,
1.	L.Piela „Idee chemii kwantowej” Warszawa, PWN wyd.1 2003, wyd.2 2012
2.	W.Kołos, J.Sadlej „Atom i cząsteczka”, Warszawa, PWN wyd.1 1998, wyd.2
3.	W.Kołos, „Chemia kwantowa”, Warszawa, PWN, 1978
4.	P.W.Atkins, „Chemia fizyczna”, Warszawa, PWN, 2003

Metody oceny	ocena na podstawie rozmowy z wykładowcą
---------------------	---

Uwagi dodatkowe	Atrakcyjność wykładu będzie zależała w znacznym stopniu od słuchaczy, np. doktorantów, którzy, jako pochodzący z różnych dziedzin, mogą dodać do wykładu nowe aspekty i uzyskać komentarz wykładowcy. Wykład uruchomiony jeśli zbierze się co najmniej 20 osób zapisanych.
------------------------	--

Wykład współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

