

**Nazwa przedmiotu:** Modelowanie kwantowochemiczne właściwości molekularnych (1200-2MON3L)

**Nazwa w języku polskim:**

**Nazwa w jęz. angielskim:** Quantum Chemical Modeling of Molecular Properties

**Dane dotyczące przedmiotu:**

**Jednostka oferująca przedmiot:** Wydział Chemii

**Przedmiot dla jednostki:** Wydział Chemii

**Język wykładowy:**

polski

**Skrócony opis:**

Zdobycie wiadomości o podstawach modelowania kwantowochemicznego parametrów spektroskopii optycznych (elektronowych i oscylacyjnych) oraz jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR) i elektronowego rezonansu paramagnetycznego (EPR) oraz narzędziach do tego służących.

**Opis:**

Wykład przeznaczony jest dla studentów zamierzających wykorzystywać metody spektroskopowe i modelowania molekularnego w pracy badawczej, niezależnie od specjalizacji. Zakres materiału: Definicje właściwości molekularnych oraz związek z parametrami uzyskiwanymi metodami spektroskopowymi. Przypomnienie wiadomości o podstawowych metodach kwantowochemicznych stosowanych w obliczeniach dla cząsteczek: metoda Hartree-Focka, metody ab initio uwzględniające korelację elektronową, teoria funkcjonału gęstości. Parametry widm elektronowych: energia wzbudzenia, moment przejścia (siła oscylatora). Parametry widm dichroizmu kołowego. Parametry widm oscylacyjnych: częstotliwości drgań, intensywności widm w podczerwieni, intensywności widm Ramana. Stałe ekranowania/przesunięcia chemicznego NMR oraz stałe sprzężenia spinowo-spinowego. Stała sprzężenia spinowo-orbitalnego i czynnik g w widmach EPR. Programy komputerowe służące do obliczeń właściwości molekularnych (Gaussian, Dalton).

**Literatura:**

1. Lucja Piela "Idee chemii kwantowej" PWN, Warszawa, 2003
2. J. Sadlej "Metody obliczeniowe chemii kwantowej. Ab initio, CNDO, INDO, NDDO" PWN, Warszawa, 1988
3. M. Jaszuński, A. Rizzo, K. Ruud, "Electric, magnetic and optical properties and their ab initio calculation in the DALTON program" <http://folk.uio.no/michalj/>
4. Notatki dostępne u prowadzącej

**Efekty kształcenia:**

Student rozumie zależność między właściwościami molekularnymi a widmami molekularnymi i potrafi dobrać odpowiednią metodę do ich symulacji na podstawie obliczeń kwantowochemicznych.

**Metody i kryteria oceniania:**

Egzamin pisemny

**Praktyki zawodowe:**

Nie dotyczy

**Rodzaj przedmiotu**

monograficzne

**Założenia (opisowo)**

Zakłada się, że student ma wiedzę ze spektroskopii i chemii kwantowej na poziomie zajęć Chemia Kwantowa i Spektroskopia Molekularna na Wydziale Chemii UW dla studentów 1-go roku studiów magisterskich.

**Punkty przedmiotu w cyklach:**

<bez przypisanego programu>

Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	1,5	2010L	