**Nazwa przedmiotu:**

Modelowanie molekularne

**Koordynator przedmiotu:**

dr hab. inż. Halina Szatyłowicz

**Status przedmiotu:**

Fakultatywny dowolnego wyboru

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Wspólne

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

3 / rok ak. 2010/2011

**Liczba punktów ECTS:**

3

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład: | 15h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 0h |
| Projekt: | 0h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Matematyka

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

Celem zajęć jest poznanie technik używanych w modelowaniu struktury i właściwości cząsteczek, korelacji między tymi wielkościami, oraz zastosowanie obliczeń kwantowo-mechanicznych do badań oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych, ze szczególnym uwzględnieniem wiązań wodorowych.

**Treści kształcenia:**

Celem zajęć jest poznanie technik używanych w modelowaniu struktury i właściwości cząsteczek, korelacji między tymi wielkościami, oraz zastosowanie obliczeń kwantowo-mechanicznych do badań oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych, ze szczególnym uwzględnieniem wiązań wodorowych.
W ramach wykładu zostaną przedstawione podstawowe pojęcia modelowania molekularnego: (i) metody chemii teoretycznej (metody: mechaniki molekularnej, półempiryczne, ab initio, metody oparte na teorii funkcjonałów gęstości, dynamiki molekularnej), (ii) bazy funkcyjne, (iii) korelacja elektronowa, (iv) teoria oddziaływań międzycząsteczkowych.
Wyniki obliczeń są źródłem cennych informacji (struktura cząsteczki, rozkład gęstości elektronowej, widma oscylacyjnych, NMR, efekty energetyczne reakcji, itd.). Omówione będą (na laboratorium przetestowane) problemy: (i) wyboru metody obliczeniowej adekwatnej do postawionego celu badawczego, (ii) porównanie wyników obliczeń z dostępnymi wynikami badań doświadczalnych.
Przedstawiony będzie wzrost znaczenia metod obliczeniowych wynikający z postępu w technikach i możliwościach obliczeniowych w połączeniu z powstaniem i rozwojem nowych teorii łączących mechanikę kwantową z chemią klasyczną. Dwie spośród nich: atom w cząsteczce (Atom in Molecules, AIM) i koncepcja naturalnych orbitali wiązań (Natural Bond Orbital, NBO) będą omówione na wykładzie oraz wykorzystane na laboratorium.
Laboratorium:
1. Przygotowanie danych i wizualizacja wyników obliczeń.
2. Optymalizacja geometrii, porównanie wyników uzyskanych różnymi metodami.
3. Bariera rotacji wokół wiązania pojedynczego i podwójnego.
4. Obliczenia entalpii reakcji.
5. Wpływ bazy funkcyjnej na wyniki obliczeń przesunięcia chemicznego H1 NMR.
6. Symulacja oddziaływań poprzez międzycząsteczkowe wiązanie wodorowe.
7. Badanie wpływu mocy oddziaływań na właściwości monomeru.

**Metody oceny:**

Ocena zintegrowana. Składa się na nią ocena z kolokwium pisemnego (z materiału wykładowego) i ocena pracy w laboratorium (odpowiednio do 40% i 60% oceny maksymalnej). Uzyskanie powyżej 1/3 liczby punktów z kolokwium warunkuje dopuszczenie do uczestnictwa w laboratorium. W trakcie laboratorium oceniane jest każde z ćwiczeń 2–7. Uzyskanie powyżej 50% punktów jest warunkiem zaliczenia.

**Egzamin:**

**Literatura:**

Literatura podstawowa:
1. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa, 2001.
2. W. Kołos, J. Sadlej, Atom i cząsteczka, WNT, Warszawa, 1998, 2007.
3. W. Kołos, Chemia kwantowa, PWN, Warszawa, 1991.
4. J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Second Edition, Gaussian Inc., Pittsburg, 1996.
5. P.L.A. Popelier, Atoms in Molecules – An Introduction, Pearson Education, Harlow, 2000.
6. F. Weinhold, C.R. Landis, Valency and Bonding. A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
Literatura uzupełniająca:
1. R.F.W. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory, Oxford University Press, Oxford, UK, 1990.
2. S. Scheiner, Hydrogen Bonding, A Theoretical Perspective, Oxford University Press, Oxford, 1997.
3. J. Sadlej, Obliczeniowe metody chemii kwantowej CNDO, INDO, ab initio, PWN, Warszawa, 1988.

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe