

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Wydział Chemii

HighChem - interdyscyplinarne i międzynarodowe studia doktoranckie z elementami wsparcia współpracy międzysektorowej

Obliczenia kwantowo-mechaniczne przy użyciu programu Gaussian 03W

dr Jerzy Stanek

Warsztat badacza

Dziedzina/ dyscyplina	chemia
Rodzaj zajęć	warsztat
Język	polski
Punkty ETCS	1
Liczba godzin	15
Cel zajęć	Poznanie programu komputerowego Gaussian 03W oraz GaussView pod kątem prowadzenia obliczeń kwantowo-mechanicznych dla wybranych cząsteczek chemicznych
Treści kształcenia	<ul style="list-style-type: none"> • obliczenia kwantowo-mechaniczne metodami: ab-initio, semiempirycznymi oraz DFT • bazy funkcyjne • optymalizacja geometrii oraz analiza konformacyjna wybranych cząsteczek • analiza kompleksów przejściowych • badanie ścieżki reakcji • obliczenia energii oddziaływań międzycząsteczkowych • termodynamika reakcji chemicznych
Wymagania wstępne	Brak
Efekty kształcenia	
Po zakończeniu zajęć doktorant potrafi:	Metody weryfikacji
sprawnie porusza się w środowisku programu komputerowego Gaussian i GaussView	Egzamin praktyczny
zna składnię plików wsadowych programu Gaussian, umie wykorzystać do tego celu program GaussView	
potrafi analizować pliki wynikowe programu Gaussian	
potrafi wykonać różnego typu obliczenia w programie Gaussian	
zna sposoby obrazowania wyników za pomocą programu GaussView	
Literatura	James B. Foresman, A.Eleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian, Inc., Wallingford, CT USA 2015 Anna Kaczmarek-Kędziera, Marta Ziegler-Borowska, Dariusz Kędziera, Chemia

	obliczeniowa, WN Uniwersytetu im. Mikołaja Kopernika, Toruń 2014
Szczegółowe informacje	stanek@amu.edu.pl Harmonogram: 21.03.2019, godz. 14:05-16:35 28.03.2019, godz. 14:05-16:35 04.04.2019, godz. 14:05-16:35 18.04.2019, godz. 14:05-16:35 25.04.2019, godz. 14:05-16:35

Zajęcia realizowane z projektu nr POWR.03.02.00-00-I020/17 dofinansowanego w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój osi priorytetowej III: Szkolnictwo wyższe dla gospodarki i rozwoju, działania: 3.2 Studia doktoranckie.