

## Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

### Wydział Chemii

**ChemInter** - wysokiej jakości międzynarodowy i interdyscyplinarny program studiów doktoranckich realizowany na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

### Obliczenia kwantowo-mechaniczne przy użyciu programu Gaussian 03W

dr Jerzy Stanek

#### Warsztat badacza

|                                  |  |
|----------------------------------|--|
| <b>Dziedzina/<br/>dyscyplina</b> | chemia   |
| <b>Rodzaj zajęć</b>              | warsztat   |
| <b>Język</b>                     | polski   |
| <b>Punkty ETCS</b>               | 1  |
| <b>Liczba godzin</b>             | 15   |
| <b>Cel zajęć</b>                 | Poznanie programu komputerowego Gaussian 03W oraz GaussView pod kątem prowadzenia obliczeń kwantowo-mechanicznych dla wybranych cząsteczek chemicznych   |
| <b>Treści kształcenia</b>        | <ul style="list-style-type: none"> <li>• obliczenia kwantowo-mechaniczne metodami: ab-initio, semiempirycznymi oraz DFT</li> <li>• bazy funkcyjne</li> <li>• optymalizacja geometrii oraz analiza konformacyjna wybranych cząsteczek</li> <li>• analiza kompleksów przejściowych</li> <li>• badanie ścieżki reakcji</li> <li>• obliczenia energii oddziaływań międzycząsteczkowych</li> <li>• termodynamika reakcji chemicznych</li> </ul> |
| <b>Wymagania wstępne</b>         | 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                                     |   |
| <b>Literatura</b>  | James B. Foresman, A.Eleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian, Inc., Wallingford, CT USA 2015<br>Anna Kaczmarek-Kędziera, Marta Ziegler-Borowska, Dariusz Kędziera, Chemia |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
|                               | obliczeniowa, WN Uniwersytetu im. Mikołaja Kopernika, Toruń 2014  |
| <b>Szczegółowe informacje</b> | <a href="mailto:stanek@amu.edu.pl">stanek@amu.edu.pl</a><br><br>Harmonogram:<br>13.05.2019, godz. 10:45 – 13:15 (3 godziny zajęć)<br>20.05.2019, godz. 10:45 – 13:15 (3 godziny zajęć)<br>27.05.2019, godz. 10:45 – 13:15 (3 godziny zajęć)<br>03.06.2019, godz. 10:45 – 13:15 (3 godziny zajęć)<br>10.06.2019, godz. 10:45 – 13:15 (3 godziny zajęć) |

Zajęcia realizowane z projektu nr POWR.03.02.00-00-I026/16 dofinansowanego w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój osi priorytetowej III: Szkolnictwo wyższe dla gospodarki i rozwoju, działania: 3.2 Studia doktoranckie.