



**UCHWAŁA NR 21  
RADY DYDAKTYCZNEJ WYDZIAŁU CHEMII**

z dnia 27 września 2022 r.

**w sprawie wprowadzenia do oferty dydaktycznej w semestrze letnim roku akademickiego 2022/2023 r. zajęć monograficznych pt. „Teoria funkcyjonału gęstości elektronowej i jej zastosowania”**

Na podstawie § 68 ust. 2 Statutu Uniwersytetu Warszawskiego (Monitor UW z 2019 r. Poz. 190) Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii postanawia co następuje:

**§ 1**

Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii wyraża pozytywną opinię w sprawie wprowadzenia do oferty dydaktycznej w semestrze letnim roku akademickiego 2022/2023 zajęć monograficznych pt. „Teoria funkcyjonału gęstości elektronowej i jej zastosowania”. Sylabus przedmiotu stanowi załącznik do uchwały.

**§ 2**

Uchwała wchodzi w życie z dniem podjęcia.

Przewodnicząca Rady Dydaktycznej

prof. dr hab. Beata Krasnodębska-Ostręga



## Sylabus

Proponowani prowadzący/ koordynatorzy zajęć: dr Michał Hapka, dr Marcin Modrzejewski

|                            |                                                                                                         |
|----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Kod przedmiotu:</b>     |                                                                                                         |
| <b>Nazwa przedmiotu:</b>   | Teoria funkcjonału gęstości elektronowej i jej zastosowania                                             |
| <b>Jednostka:</b>          | Wydział Chemii                                                                                          |
| <b>Grupy:</b>              | Wykłady monograficzne w semestrze letnim<br>Wykłady monograficzne w semestrze letnim (Szkola Doktorska) |
| <b>Punkty ECTS i inne:</b> | 1.50                                                                                                    |
| <b>Język prowadzenia:</b>  | polski lub angielski                                                                                    |
| <b>Rodzaj przedmiotu:</b>  | monograficzny                                                                                           |
| <b>Założenia:</b>          | Ukończenie kursu chemii kwantowej i matematyki na Wydziale Chemii UW lub równoważnego.                  |
| <b>Tryb prowadzenia:</b>   | stacjonarny                                                                                             |
|                            |                                                                                                         |



|                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Skrócony opis:</b> | Wykład poszerza wiedzę studentów na temat teorii funkcjonału gęstości elektronowej ze szczególnym uwzględnieniem jej formalizmu matematycznego oraz zastosowań do obliczania energii oraz własności spektroskopowych molekuł. Po wstępnej części obejmującej dyskusję zasadniczych twierdzeń następuje przejście do zaawansowanych zagadnień praktycznych, m.in. wyboru przybliżenia energii korelacyjno-wymiennej oraz bazy orbitalnej w obliczeniach energii układów niekowalencyjnych, jak też w modelowaniu widm wzbudzeń elektronowych.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <b>Pełny opis:</b>    | <p>Celem wykładu jest poszerzenie wiedzy studentów na temat teorii funkcjonału gęstości elektronowej ze szczególnym uwzględnieniem jej formalizmu matematycznego oraz zastosowań do obliczania energii oraz własności spektroskopowych molekuł.</p> <p>Po wstępnej części obejmującej dyskusję zasadniczych twierdzeń następuje przejście do zaawansowanych zagadnień związanych z praktycznym zastosowaniem metod obliczeniowych w modelowaniu układów niekowalencyjnych oraz przewidywaniu własności spektroskopowych molekuł. Przebieg wykładu jest następujący:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Matematyczny formalizm DFT: problem wyrażenia energii elektronowej układu jako funkcjonału gęstości elektronowej.</li> <li>2. Równania Kohna-Shama oraz interpretacja fizyczna orbitali. Związek energii orbitalnych Kohna-Shama z wertykalnymi potencjałami jonizacji.</li> <li>3. Zakres stosowalności metod przybliżonych DFT dostępnych w najnowszej literaturze. Metody prawidłowego uwzględnienia oddziaływania dyspersyjnego w dimerach molekularnych, klasterach molekuł i kryształach molekularnych.</li> <li>4. Elementy formalizmu zależnego od czasu (Time-Dependent DFT): twierdzenia Runge-Grossa, propagacja w czasie orbitali Kohna-Shama.</li> <li>5. Widma wzbudzeń elektronowych w metodzie równań odpowiedzi liniowej TDDFT. Modelowanie atomów i molekuł w silnych polach laserowych.</li> </ol> |
| <b>Literatura:</b>    | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. "A Primer in Density Functional Theory", Ed. C. Fiolhais, F. Nogueira, M. A. L. Marques, Lecture Notes in Physics, vol 620. Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.</li> <li>2. Julien Toulouse, "Review of approximations for the exchange-correlation energy in density-functional theory", <a href="https://arxiv.org/abs/2103.02645">https://arxiv.org/abs/2103.02645</a>, 2021.</li> <li>3. Axel Becke, "Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics", J. Chem. Phys. 140, 18A301 (2014).</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |



|                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Efekty uczenia się:</b>          | <p><b>WIEDZA</b></p> <p>Student/Studentka po ukończeniu wykładu:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• rozumie w pogłębionym stopniu założenia teorii funkcjonału gęstości,</li> <li>• posiada uporządkowaną i podbudowaną teoretycznie wiedzę dotyczącą szczegółów przybliżeń DFT oraz ich ograniczeń w zastosowaniu do wybranych problemów chemicznych,</li> <li>• zna i rozumie główne tendencje rozwojowe współczesnych metod DFT oraz TDDFT.</li> </ul> <p><b>UMIEJĘTNOŚCI</b></p> <p>Student/Studentka po ukończeniu wykładu:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• potrafi samodzielnie odnaleźć w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach informacje niezbędne do przeprowadzenia obliczeń z wykorzystaniem metod DFT (wybór funkcjonału korelacyjno-wymennego, bazy orbitali atomowych, programu obliczeniowego),</li> <li>• potrafi formułować i testować hipotezy związane z prostymi problemami badawczymi w zakresie modelowania oddziaływań niekowalencyjnych, obliczeniach termodynamicznych, modelowaniu widm wzbudzeń elektronowych i własności molekularnych,</li> <li>• potrafi komunikować się na tematy specjalistyczne związane z metodami DFT oraz TDDFT,</li> <li>• komunikuje się w języku angielskim na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego w zakresie słownictwa związanego z DFT oraz TDDFT.</li> </ul> <p><b>KOMPETENCJE SPOŁECZNE</b></p> <p>Student/Studentka po ukończeniu wykładu:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• potrafi w krytyczny sposób podejść do odbieranych treści z zakresu teorii funkcjonału gęstości elektronowej w celu rozwiązywania zadanych problemów chemii obliczeniowej oraz umie współpracować w grupie w celu rozwiązywania zadanych problemów chemii obliczeniowej.</li> </ul> |
| <b>Metody i kryteria oceniania:</b> | <p>egzamin: test pisemny + opcjonalna część ustna, podczas której można poprawić wyniki testu</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |