

Popis předmětu

Zkratka předmětu:	KOANCH/CA130	Strana:	1 / 2
Název předmětu:	Kvantová chemie a její využití		
Akademický rok:	2023/2024	Tisknuto:	28.05.2024 08:32

Pracoviště / Zkratka	KOANCH / CA130			Akademický rok	2023/2024
Název	Kvantová chemie a její využití			Způsob zakončení	Zkouška
Akreditováno/Kredity	Ano, 0 Kred.			Forma zakončení	Kombinovaná
Rozsah hodin					
Obs/max	Statut A	Statut B	Statut C	Zápočet před zkouškou	NE
Letní semestr	0 / -	0 / -	0 / -	Počítán do průměru	NE
Zimní semestr	0 / -	0 / -	0 / -	Min. (B+C) studentů	nestanoveno
Rozvrh	Ano			Opakovaný zápis	NE
Vyučovací jazyk	Angličtina			Vyučovaný semestr	Zimní, Letní
Volně zapisovatelný předmět	Ano			Počet dnů praxe	0
Hodnotící stupnice	S N				
Počet hodin kontaktní	0				
Automat. uzn. záp. před zk.	Ne				
Periodicita	K				
Nahrazovaný předmět	KOANCH/CD130				
Vyloučené předměty	Nejsou definovány				
Podmiňující předměty	Nejsou definovány				
Předměty informativně doporučené	Nejsou definovány				
Předměty, které předmět podmiňuje	Nejsou definovány				

Cíle předmětu (anotace):

Cílem předmětu je podat základ pro kvalifikované užívání kvantově-chemických přístupů a výpočtů. Studenti doktorského studia se naučí využívat teoretické i praktické dovednosti při řešení problémů v oblastech fyzikální chemie, spektroskopie, anorganické a organické chemie metodami teoretické chemie (energie a rozložení náboje, termodynamické charakteristiky chemických reakcí, rychlost chemických reakcí, struktura molekul,). Praktická část bude realizována na programech Spartan '02 and Gaussian '09.

Požadavky na studenta

Průběžná kontrola studia během semestru se provádí formou 1 písemné práce, jejíž výsledky se započítávají do celkové klasifikace.

Obsah

Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

Odpovídající znalosti z přírodovědních oborů.

Získané způsobilosti

Studenti získají znalosti umožňující kvalifikované užívání kvantově-chemických přístupů a výpočtů.

Studijní opory

Garanti a vyučující

- Garanti:** prof. Ing. Jaromír Vinklárek, Dr.

Literatura

- **Doporučená:** WILSON, Stephen. Handbook of molecular physics and quantum chemistry. Chichester: John Wiley. 2003.
- **Doporučená:** SZABO, Attila a Neil S. OSTLUND. Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory. Mineola: Dover Publications. 1996.
- **Doporučená:** ATKINS, P. W. a R. S. FRIEDMAN. Molecular quantum mechanics. 5th ed. Oxford: Oxford University. 2011.

Časová náročnost

Všechny formy studia

Aktivita	Časová náročnost aktivity [h]
Domácí příprava na výuku	10
Sběr materiálu	20
Účast na výuce	30
Příprava na souhrnný test	10
Celkem:	70

Vyučovací metody

Monologická (výklad, přednáška, instruktáž)
Dialogická (diskuze, rozhovor, brainstorming)

Hodnotící metody

Ústní zkouška
Písemná zkouška

Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma stud.	Obor	Etap	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Inorganic Chemistry	Doktorský	Kombinov	Inorganic Chemistry	1	2020	2023	Compulsory Option	B		
Inorganic Chemistry	Doktorský	Prezenční	Inorganic Chemistry	1	2020	2023	Compulsory Option	B		