

## Podsumowanie warsztatów „Workshop on practical quantum chemistry”

W dniach 14 – 25 maja 2018 roku na Politechnice Warszawskiej odbyły się warsztaty “Workshop on practical quantum chemistry” zorganizowane przez dr Adama Kubasa z Instytutu Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie. W skład komitetu organizacyjnego weszli dodatkowo dr Adam Tulewicz (IChF PAN; licencje na oprogramowanie, zarządzanie wersjami oprogramowania), mgr Dorota Monikowska (PW; nadzór techniczny, dystrybucja oprogramowania) oraz mgr Tomasz Trzeciak (PW; zarządzanie stroną internetową, nadzór techniczny). Do poprowadzenia zajęć, oprócz dra Adama Kubasa i dra Adama Tulewicza, zaproszeni zostali: prof. Alejandro Franco (University of Picardie Jules Verne, Amiens, Francja), dr hab. inż. Halina Szatyłowicz (PW), dr hab. Tatiana Korona (Uniwersytet Warszawski, UW), dr Michał Przybytek (UW), dr Marcin Kałek (Centrum Nowych Technologii UW) oraz mgr Maciej Marchwiany (Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego UW). W zajęciach uczestniczyło 20 osób: 5 osób z tytułem doktora, 8 doktorantów oraz 7 studentów drugiego stopnia (magistrantów).

Tematyka zajęć była bardzo szeroka i obejmowała: **(i)** charakterystykę oraz dostęp do komputerów dużej mocy (M. Marchwiany), **(ii)** modelowanie procesów elektrochemicznych z użyciem metod mechaniki molekularnej (A. Franco), **(iii)** podstawy chemii kwantowej (M. Przybytek i T. Korona), **(iv)** podstawy metody Hartree-Focka i zagadnienia związane z bazami funkcyjnymi (A. Kubas), **(v)** przegląd metod post-Hartree-Fock (T. Korona i M. Przybytek), **(vi)** podstawy teorii funkcjonału gęstości (A. Tulewicz), **(vii)** poszukiwanie punktów stacjonarnych na powierzchni energii potencjalnej cząsteczki (A. Tulewicz), **(viii)** teoretyczny opis reakcji chemicznych (M. Kałek), **(ix)** modelowanie widm IR oraz



Uczestnicy podczas zajęć z prof. A. Franco

Ramana (A. Kubas). Ostatni dzień zajęć poświęcony był zagadnieniom specjalistycznym takim jak: opis oddziaływań wodorowych na poziomie kwantowym (H. Szatyłowicz), wyzwania w opisie kwantowym związków metali przejściowych (A. Kubas) oraz badania kwantowochemiczne skomplikowanych układów katalitycznych (M. Kałek).

Zajęcia poprowadzone zostały w nowoczesny sposób w formie interaktywnej, tj. każdy z uczestników miał dostęp do komputera (prywatnego lub udostępnionego przez Politechnikę Warszawską) z zainstalowanym oprogramowaniem specjalistycznym dostarczonym przez organizatorów. Prowadzący zostali poproszeni aby zagadnienia teoretyczne były ilustrowane przykładami obliczeń w rzeczywistym środowisku obliczeniowym używanym w codziennej pracy chemika kwantowego. Dzięki temu uczestnicy mieli możliwość zapoznania się ze sposobem dostępu do centrum superkomputerowego ICM oraz uzyskali praktyczne informacje dot. sposobu uruchamiania obliczeń kwantowochemicznych z użyciem różnych programów, m.in. Gaussian, Orca, Molpro czy Lammps. Na koniec zajęć uczestnicy zwrócili szczególną uwagę właśnie na możliwość zapoznania się z wieloma programami obliczeniowymi. Nieograniczenie się do jednego pakietu oprogramowania pozwoliło na zademonstrowanie uniwersalności przekazywanej wiedzy teoretycznej oraz pozwoliło na wskazanie mocnych i słabych stron danego programu w konkretnych zastosowaniach. Dzięki temu uczestnicy będą mogli zaprojektować własne eksperymenty obliczeniowe w tak różnych dziedzinach jak kataliza heterogeniczna czy projektowanie leków. Po zakończeniu warsztatów wszyscy uczestnicy otrzymali w formie elektronicznej pakiet materiałów przygotowany przez prowadzących. W jego skład weszły slajdy z wykładów, wszystkie pliki wejściowe do programów, skrypty BASH oraz MatLab jak również istotne publikacje naukowe.

Zainteresowanie warsztatami potwierdziło potrzebę takiego praktycznego bloku zajęć dla warszawskiego środowiska chemików – organizatorzy jak również prowadzący wyrazili chęć pracy przy kolejnych edycjach warsztatów.

W imieniu komitetu organizacyjnego warsztatów,

dr Adam Kubas

Załącznik: ogłoszenie i informacja o warsztatach ze strony internetowej Wydziału Chemicznego PW

**Workshop on practical quantum chemistry**  
14.05 – 15.05 and 21.05 – 25.05.2018  
Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology

In the last two decades increasing computer power and the development of accurate yet efficient methods in quantum chemistry allowed scientists to understand variety of chemical problems at the most basic, molecular level. Today many of the research projects are carried out at the border between theory and experiment and a typical issue in such heterogeneous environments is to find a common language. Additionally, the publications in the field of chemistry often include theoretical calculations that are not easy to interpret by non-experts. Here, the reader should at least know the limitations of the applied methodology. Moreover, nowadays knowledge of the basic quantum chemical methods can be immediately translated into real calculations due to freely available and well-documented software.

The aim of this workshop is to familiarize participants with some popular modern quantum chemical methods. The theoretical background will be limited to an unavoidable minimum and particular attention will be paid on actual applications and limitations of the methods. Particularly, during each seminar you will be asked to perform some simple calculations on yourself using your laptop and the software provided. We may also discuss possible applications of computations in your current research project.

The workshop is designed particularly for PhD and master students who would like to get theoretical and practical introduction into modern quantum chemistry and molecular modelling. Senior scientists can also benefit from the workshop as the presented state-of-the-art methods can be directly applied in many fields of chemistry. Moreover, participants will learn on one hand side what type of scientific questions can be readily answered by simple calculations and, on the second, hand how to identify problems that would require more elaborate treatment.

**The key topics covered are:**

- Basics of quantum chemistry: mathematical language and simple models
- Hartree-Fock (HF) method and accurate post-HF approaches
- Density functional theory (DFT)
- Optimization of a molecular geometry
- Reactivity: transition-state search, thermochemistry, reaction rates
- Vibrational spectroscopy (IR and Raman)
- Multiscale modelling of electrochemical processes
- Access to high-performance computing (HPC) facilities
- Practical guide to popular QM codes, e.g. Gaussian, ORCA, Molpro

**Lecturers:**

- Prof. Alejandro Franco, University of Picardie Jules Verne, Amiens, France
- Dr hab. Tatiana Korona, Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Poland
- Dr hab. inż. Halina Szatyłowicz, Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, Poland
- Dr Michał Przybytek, Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Poland
- Dr Marcin Kałek, Center of New Technologies, University of Warsaw, Poland
- Dr Adam Kubas, Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland
- Dr Adam Tulewicz, Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland
- Maciej Marchwiany, Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, Warsaw, Poland

**Language:** english or polish

## Workshop schedule

### **14.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

9:00 – 9:15 Opening by the Dean of the Faculty of Chemistry  
9:15 – 10:30 Introduction to high-performance computing at the ICM Warsaw (Maciej Marchwiany, ICM)  
10:30 – 10:45 Break  
10:45 – 12:30 Practical aspects of high-performance computing (Maciej Marchwiany, ICM)  
12:30 – 13:00 Break  
13:00 – 15:00 Software installation session

### **15.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

9:00 – 12:00 Multiscale modeling of secondary batteries: theory and practice. Part I. (A. Franco)  
12:00 – 13:00 Break  
13:00 – 15:00 Multiscale modeling of secondary batteries: theory and practice. Part II. (A. Franco)  
15:00 – 15:30 Break  
15:40 – 17:00 Multiscale modeling of secondary batteries: theory and practice. Part III. (A. Franco)

### **21.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

9:00 – 11:00 Software installation session, coffee and tea provided!  
11:00 – 12:30 Basics of quantum mechanics (T. Korona and M. Przybytek)  
12:30 – 13:00 Break  
13:00 – 15:00 From atomic orbitals to Hartree-Fock approximation (A. Kubas)

### **22.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

10:00 – 12:00 Wave function analysis: population schemes, types of molecular orbitals (A. Kubas)  
12:00 – 12:45 Break  
12:45 – 17:00 Post-HF methods (with a break, T. Korona and M. Przybytek)

### **23.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

9:00 – 11:00 Density functional theory (A. Tulewicz)  
11:00 – 11:30 Break  
11:30 – 15:00 Geometry optimisation and conformational search (incl. break, A. Tulewicz)

### **24.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 130**

11:00 – 15:30 Exploring reactivity with quantum chemical methods (incl. break, M. Kałek)  
15:30 – 15:45 Break  
15:45 – 17:00 Theoretical IR and Raman spectroscopy (A. Kubas)

### **25.05.2018: Chemical Technology building (Gmach Technologii Chemicznej), seminar room 257**

8:30 – 10:00 Specialized lecture: H-bonds – identification and analysis (H. Szatyłowicz)  
10:00 – 10:30 Break  
10:30 – 12:00 Specialized lecture: Transition metal complex: theoretical issues and recommendations (A. Kubas)  
12:00 – 12:30 Break  
12:30 – 14:00 Specialized lecture: Analysis of Selectivity in Synergistic Catalysis by Means of Combined DFT Calculations and Kinetics Simulations (M. Kałek)