



## SEKCJA CHEMII TEORETYCZNEJ

[www.chem.umk.pl/ptch/teoptch](http://www.chem.umk.pl/ptch/teoptch)

Toruń 21 Listopada 2011 r.

Szanowni Chemicy Kwantowi,  
Nadszedł czas na nową gazetkę Psi\*. Trochę spóźnioną, za co przepraszam.

### KONFERENCJE

- 1W dniach 25—28 września w Toruniu odbyło się 10th Central European Symposium on Theoretical Chemistry. W imieniu organizatorów konferencji dziękuję wszystkim uczestnikom za liczny udział, wysoki poziom naukowy konferencji i wspaniałą atmosferę. Pełna dokumentacja konferencji i zdjęcia znajdują się na stronie: <http://www.cestc.chem.umk.pl/>.
- Kolejną konferencję CESTC 2012 organizują nasi przyjaciele z Austrii. Odbędzie się ona w dniach 2—5 września, 2012 r. w miejscowości Mariapfarr (Salzburg)
- W dniach 18—22 września 2011, w Lublinie, odbył się 54 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego.
- 55 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego odbędzie się w dniach 16—20 września 2012 w Białymstoku. Planuję, aby w roku 2012 sekcja chemii kwantowej była sekcją niezależną, a nie łączoną z sekcją chemii fizycznej, tak jak to miało miejsce przez ostatnie kilka lat. Pomysł na charakter naukowy naszej sekcji przedstawię wkrótce.

### SZKOŁY

- Pracuję nad kontynuacją warszawskiej idei ogólnopolskich szkół/obozów z chemii kwantowej. Zaczniemy chyba dopiero w przyszłym roku akademickim/kalendarzowym. Oto moje propozycje tematyki naukowej Szkół na kilka lat:
  - „Symetria Cząsteczek i Teoria Grup” -- ?
  - „Teoria Funkcjonałów Gęstości. Podstawy i zastosowania” -- Kraków
  - „Relatywistyczna Chemia Kwantowa. Podstawy i zastosowania” -- Toruń
  - „Właściwości elektryczne, magnetyczne i optyczne cząsteczek” -- ?
  - „Metody korelacji elektronowej: Metody Sprzężonych Klasterów” -- Katowice
  - „Oddziaływania Międzycząsteczkowe” -- ?

Kolejność tematyki jest podana przypadkowo. Obecnie czekam jeszcze na propozycje, deklaracje innych ośrodków.

### STRONA INTERNETOWA

- Zgodnie z obietnicą utworzyliśmy stronę internetową Sekcji Chemii Teoretycznej. Adres strony: <http://www.chem.umk.pl/ptch/teoptch/>. Na stronie mogą państwo znaleźć następujące wiadomości:
  - historię rozwoju badań chemii kwantowej w Polsce oraz listę aktywnie działających grup – materiał opracowany przez prof. Bogumiła Jeziorskiego
  - kolejne numery gazetki Psi\*
  - informacje o szkołach i konferencjach w Polsce – proszę o nadsyłanie dodatkowych danych na mój adres.
  - informacje o ofertach pracy – proszę również o nadsyłanie swoich danych z ofertami pracy, studiów doktorskich czy ofert post-doktorskich.
  - dział Nasi Mistrzowie – Na stronie umieściłam informacje o profesorach chemii teoretycznej, którym wiele zawdzięczamy a których już z nami nie ma. Dziękuję bardzo za materiały prof. Ewie Broclawik, prof. Lucjanowi Pielu i prof. Jackowi Komasiu. Brakujące informacje dołączę wkrótce.
  - kolejne sylwetki naszych mistrzów, które pojawią się na tej stronie będą państwa inicjatywą. Chciałabym, żeby to uczniowie przysyłali do mnie informacje o swoich mistrzach. Proszę też o uzupełnienia do tego co już mamy. Każdy komentarz jest mile widziany.
  - informacje o nagrodach – również proszę o przysyłanie ciekawych i ważnych informacji
  - nad grafiką strony jeszcze pracujemy i będzie zmieniana.

### DYSKUSJA

- Prosiłam, aby państwo wypowiedzieli się na temat 'Czy godzimy się na to, żeby uczyć chemii kwantowej na zasadzie „wciśnij guzik a otrzymasz odpowiedź"'. Dostałam w zasadzie jeden komentarz profesora Lucjana Pielu z którym się zgadzam. Brzmi on mniej więcej tak 'Nie da się walczyć z powstawaniem nowych zajęć z obliczeniowej chemii kwantowej prowadzonych na niskim poziomie. Możemy jednak się bronić. Trzeba po prostu na wszystkich obronach prac magisterskich, doktorskich i prezentacjach habilitacyjnych w których prowadzi się obliczenia zadawać pytania z chemii kwantowej'. Jeżeli ktoś chciałby dodać swój komentarz do dyskusji (odmienny również) to zapraszam.

### UWAGI

- Sądzę, że celem naszej działalności w ramach Sekcji jest powstanie miejsca gdzie możemy się wzajemnie komunikować, przekazywać wzajemnie informacje i jednoczyć w ważnych sprawach. Działanie Sekcji będzie miało sens gdy Państwo się włączą do tego działania i będą nadsyłać mi wszystkie dane o zdarzeniach ważnych, nawet tylko lokalnie. Bardzo o to proszę.

Redaktorka gazetki 'Psi\*',  
Maria Barysz  
e-mail: [teomjb@chem.umk.pl](mailto:teomjb@chem.umk.pl)