

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Chemia teoretyczna		13.3.0456	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia i technologia środowiska, chemia biomedyczna, analityka i
		specjalnościowy	diagnostyka chemiczna, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Józef Liwo; prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski; dr Artur Giełdoń			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		6	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 75 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 65 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 150 godz. - 6 ECTS	
Wykład: 30 godz., Ćw. audytoryjne: 45 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2016/2017 zimowy			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
obowiązkowy	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
	Sposób zaliczenia		
	- Egzamin		
	- Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
- egzamin pisemny z pytaniami (zadaniami) otwartymi			
- kolokwium			
- egzamin ustny			
Podstawowe kryteria oceny			
Ćwiczenia audytoryjne: zaliczenie dwóch pisemnych kolokwium na ocenę pozytywną (od 50% maksymalnej liczby punktów). Ocena końcowa: średnia arytmetyczna ocen z kolokwium, zwiększona o punkty premiowe za aktywność na ćwiczeniach. Wykład: zdanie egzaminu pisemnego na ocenę pozytywną (od 50% maksymalnej liczby punktów) lub w przypadku uzyskania 40% maksymalnej liczby punktów z egzaminu pisemnego pozytywnie zdanie indywidualnego uzupełnienia egzaminu (z materiału, który wypadł niezadowolająco na egzaminie pisemnym). Ocena bardzo dobra z ćwiczeń zwalnia z egzaminu, z oceną bardzo dobrą.			
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

student poprawnie określa elementy geometrii cząsteczki i wie jak zastosować właściwe wzory do ich obliczenia (K_W08). Poprawnie określa składowe energii konformacyjnej cząsteczki i zna ogólną postać analitycznych wzorów na te składowe (K_W08). Wie jak przy pomocy wiedzy matematycznej nabytej we wcześniejszych etapach edukacji zlokalizować punkty krytyczne na hiperpowierzchni energii potencjalnej układu molekularnego oraz obliczyć drgania normalne cząsteczki (K_W06). Wie czego dotyczy prawo rozkładu Boltzmanna oraz jakie są jego zastosowania w chemii i fizyce oraz definiuje trzy podstawowe zespoły w mechanice statystycznej. Wie, jak funkcje termodynamiczne są powiązane z mikrostanami układu oraz jak powiązać makroskopowe właściwości układów chemicznych w fazie gazowej z energetyką pojedynczych atomów/cząsteczek tworzących zespół (K_W08).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Student rozwiązuje 5 zadań oraz analogiczny egzamin pisemny, 2 testy/sem. Ponadto, na początku każdego z ćwiczeń audytoryjnych student ma możliwość samooceny poprzez udział w 15-minutowej kartkówce, która nie jest oceniana przez prowadzącego. Umiejętności studenta są również na bieżąco oceniane przez prowadzącego podczas rozwiązywania zadań przez danego studenta przy tablicy (K_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Studenta rozwiązuje zadania przy tablicy; oceniana jest jego inicjatywa i asertywność. W czasie kolokwium i egzaminu student ma do dyspozycji dostarczone przez prowadzącego/wykładowcę zestaw najbardziej podstawowych wzorów niezbędnych do rozwiązywania postawionych problemów, co pozwala ocenić w jakim stopniu potrafi wykorzystać dostępną wiedzę. (K_K01)

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

Matematyka, Fizyka, Podstawy chemii, Chemia kwantowa, Chemia fizyczna

B. Wymagania wstępne

znajomość podstawowych funkcji arytmetycznych, podstaw rachunku różniczkowego i całkowego, podstaw algebry macierzowej, równań różniczkowych zwyczajnych, kinematyki i dynamiki punktu materialnego i bryły sztywnej, ruchu harmonicznego, postulatów mechaniki kwantowej, rozwiązań równania Schrodingera dla prostych układów (cząstka swobodna w pudle, rotator sztywny, oscylator harmoniczny), termów atomowych, posługiwania się funkcjami termodynamicznymi (diagram Gibbsa).

Cele kształcenia

- Zapoznanie studentów z podstawami modelowania molekularnego.
- Przekazanie studentom podstawowej wiedzy z podstaw mechaniki statystycznej oraz nauczanie umiejętności jej stosowania w zagadnieniach chemicznych.

Treści programowe

Opis geometrii cząsteczki. Współrzędne kartezjańskie i wewnętrzne. Opis hiperpowierzchni energii potencjalnej. Minima, maksima, punkty siodłowe pierwszego rzędu i ich sens fizyczny. Punkty siodłowe wyższych rzędów. Empiryczne pola siłowe i ich zastosowania. Metody lokalnej minimalizacji energii. Drgania normalne cząsteczek. Dynamika molekularna. Równania ruchu i metody ich numerycznego rozwiązywania. Metody Monte Carlo. Mechanika statystyczna: Elementy rachunku prawdopodobieństwa, rozkłady zmiennych losowych, średnie i fluktuacje. Gęstość stanów. Zespoły statystyczne: mikrokanoniczny, kanoniczny, wielki zespół kanoniczny, zespół izotermiczno-izobaryczny. Prawo rozkładu Boltzmanna. Zasada ekwipartycji energii. Funkcje podziału zespołów statystycznych oraz ich pochodne i ich związek z wielkościami termodynamicznymi. Molekularna interpretacja energii, entropii, potencjałów termodynamicznych i potencjałów chemicznych i jej związek z interpretacją fenomenologiczną. Entropia a teoria informacji. Statystyka Bosego-Einsteina i Fermiego-Diraca. Funkcje podziału układów nieoddziałujących cząstek oraz cząsteczek dwu- i wieloatomowych. Obliczanie termodynamicznych poprawek do funkcji termodynamicznych związków chemicznych w fazie gazowej w przybliżeniu harmonicznym. Obliczanie stałych równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej na podstawie pierwszych zasad. Obliczanie funkcji podziału gazów niedoskonałych.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

- A.1. wykorzystywana podczas zajęć: N. A. Smirnowa, Elementy termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, PWN,
A.2. studiowana samodzielnie przez studenta: K. Gumiński; P. Petelenz, Elementy chemii teoretycznej, PWN; H. Bu-chowski, Elementy termodynamiki statystycznej, PWN
- B. Literatura uzupełniająca
- A.R. Leach: Molecular Modeling: Principles and Applications, Pearson Education EMA, 2001.
K.Gumiński, Termodynamika, PWN, Warszawa 1972.
R.P. Feynman, Wykłady z mechaniki statystycznej, PWN, Warszawa 1980.
K. Huang, Mechanika statystyczna, PWN, Warszawa 1987.
F. Reif, Fizyka statystyczna, PWN, Warszawa 1971.
D. McQuarrie, Statistical Mechanics, University Science Books, 2000.

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o

Wiedza

Student opisuje geometrię cząsteczek poprzez współrzędne kartezjańskie i wewnętrzne, wyjaśnia pojęcie i opisuje topologię hiperpowierzchni energii

średnim poziomie złożoności; K_W08: wykazuje się znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii; K_U04: stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	potencjalnej cząsteczki, definiuje energię układu cząsteczek w przybliżeniu mechaniki molekularnej, nazywa podstawowe pojęcia dynamiki molekularnej, opisuje prawo rozkładu Boltzmann, definiuje funkcję rozkładu oraz opisuje jej związek z funkcjami termodynamicznymi, opisuje statystyki Bosego-Einsteina i Fermiego-Diraca, wyjaśnia zastosowania mechaniki statystycznej do obliczania funkcji termodynamicznych gazów atomowych i cząsteczkowych oraz obliczania stałych równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej.
	Umiejętności Student oblicza współrzędne wewnętrzne z kartezjańskich i odwrotnie, oblicza minima energii i stany przejściowe na hiperpowierzchni energii potencjalnej cząsteczki, oblicza energię i siły działające na układ w przybliżeniu mechaniki molekularnej, rozwiązuje równanie ruchu harmonicznego, oblicza częstości własne cząsteczek dwuatomowych oraz ich stałe siłowe wiązań oraz momenty bezwładności z danych spektroskopowych, oblicza wielkości termodynamiczne na podstawie sumy statystycznej, oblicza wielkości termodynamiczne gazów atomowych i cząsteczkowych oraz stałe równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej z pierwszych zasad.
	Kompetencje społeczne (postawy) Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego myślenia i wnioskowania oraz precyzyjnego i starannego prowadzenia obliczeń.
Kontakt adam.liwo@ug.edu.pl	