

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Chemia teoretyczna ZAO		13.3.0461	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	niestacjonarne (zaoczne)
		moduł	zarządzanie substancjami niebezpiecznymi, zaawansowana analityka
		specjalnościowy	chemiczna
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Józef Liwo; dr Artur Giełdoń; prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		6	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 95 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 150 godz. - 6 ECTS	
Wykład: 18 godz., Ćw. audytoryjne: 27 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 Schrödingera 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)****Wiedza**

K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o 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;	Student opisuje geometrię cząsteczek poprzez współrzędne kartezjańskie i wewnętrzne, wyjaśnia pojęcie i opisuje topologię hiperpowierzchni energii potencjalnej cząsteczki, definiuje energię układu cząsteczek w przybliżeniu mechaniki molekularnej, nazywa podstawowe pojęcia dynamiki molekularnej, opisuje prawo rozkładu Boltzmanna, 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	