

**KAPITAŁ LUDZKI**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

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 hab. Artur Giełdoń; prof. dr hab. Cezary Czaplewski, profesor uczelni			
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 30 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 75 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 150 godz. - 6 ECTS	
Wykład: 18 godz., Ćw. audytoryjne: 27 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2021/2022 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Rozwiązywanie zadań - Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
		- Zaliczenie na ocenę - Egzamin	
		Formy zaliczenia	
		- egzamin ustny - egzamin pisemny z pytaniami (zadaniami) otwartymi - kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	
		Ćwiczenia audytoryjne: zaliczenie dwóch pisemnych kolokwiów na ocenę pozytywną (od 50% maksymalnej liczby punktów). Ocena końcowa: średnia arytmetyczna ocen z kolokwiów, 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 uczenia się			

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

student podczas zaliczenia określa elementy geometrii cząsteczki i wskazuje zastosowanie wzorów do ich obliczenia (K_W08). Określa składowe energii konformacyjnej cząsteczki i ogólną postać analitycznych wzorów na te składowe (K_W08). Określa 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, K_W07). Określa czego dotyczy prawo rozkładu Boltzmanna oraz jakie są jego zastosowania w chemii i fizyce oraz definiuje trzy podstawowe zespoły w mechanice statystycznej. Przedstawia, 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 nabycia 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 nauczenie 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.

Kierunkowe efekty uczenia się

K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do

Wiedza

Student opisuje geometrię cząsteczek poprzez współrzędne kartezjańskie i

<p>zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o pogłębionym poziomie złożoności; K_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o wyższym stopniu złożoności; K_W08: wykazuje się pogłębioną 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;</p>	<p>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 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.</p>
	<p>Umiejętności</p> <p>Student oblicza współrzędne wewnętrzne z kartezyjskich 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.</p>
	<p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <p>Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego myślenia i wnioskowania oraz precyzyjnego i starannego prowadzenia obliczeń.</p>
<p>Kontakt</p> <p>adam.liwo@ug.edu.pl</p>	