

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

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Chemia teoretyczna		13.3.0456	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Teoretycznej			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia i
		specjalnościowy	technologia środowiska, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Józef Liwo; prof. dr hab. Cezary Czaplowski; dr hab. Artur Giełdoń			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		6	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia 75 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 10 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 65 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 150 godz. - 6 ECTS	
Ćw. audytoryjne: 45 godz., Wykład: 30 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2020/2021 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
- Rozwiązywanie zadań - Wykład z prezentacją multimedialną		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		- Zaliczenie na ocenę - Egzamin	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		- egzamin ustny - egzamin pisemny z pytaniami (zadaniami) otwartymi - kolokwium	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		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.	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			

**Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:**

student określa elementy geometrii cząsteczki i stosuje wzory do ich obliczenia (K\_W08). Określa składowe energii konformacyjnej cząsteczki i wyjaśnia ogólną postać analitycznych wzorów na te składowe (K\_W08). Wyjaśnia 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). Wyjaśnia czego dotyczy prawo rozkładu Boltzmanna oraz jakie są jego zastosowania w chemii i fizyce oraz definiuje trzy podstawowe zespoły w mechanice statystycznej. Wyjaśnia, 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\_W07; 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 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

**Kierunkowe efekty kształcenia**

K\_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności;

K\_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności;

K\_W08: wykazuje się znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do

**Wiedza**

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.

<p>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>	<b>Umiejętności</b> <p>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.</p>
	<b>Kompetencje społeczne (postawy)</b> <p>Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego myślenia i wnioskowania oraz precyzyjnego i starannego prowadzenia obliczeń.</p>
<b>Kontakt</b> <p>adam.liwo@ug.edu.pl</p>	