

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Specialization lecture: Statistical mechanics in chemistry (Wykład), PG_00117810						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			angielski brak uwag		
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Józef Liwo					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. Józef Liwo					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		40.0	75
Cel przedmiotu	Poznanie przez studenta podstaw mechaniki statystycznej oraz jej zastosowań w chemii.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student identyfikuje swoje braki w wiedzy z dziedziny chemii, fizyki i matematyki oraz poznaje drogi pogłębienia rozumienia zjawisk chemicznych na gruncie atomowym.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja [SK5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student stosuje odpowiednie metody analizy matematycznej oraz algebry liniowej.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student stosuje metody mechaniki statystycznej do rozwiązywania problemów chemicznych.	[SU5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student poznaje zastosowanie mechaniki statystycznej do opisu układów i zjawisk chemicznych na poziomie średniozaawansowanym i stosuje odpowiednie metody analizy matematycznej oraz algebry liniowej.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U11] Komunikuje się w języku obcym na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego oraz potrafi posługiwać się specjalistyczną terminologią.	Student zapoznaje się z anglojęzyczną terminologią z dziedziny mechaniki statystycznej.	[SU5] realizacja zadania problemowego
[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizacji zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student stosuje metody mechaniki statystycznej do rozwiązywania problemów chemicznych.	[SK5] realizacja zadania problemowego	
Treści przedmiotu	Geometria i hiperpowierzchnia energii cząsteczki, prawdopodobieństwo, zmienne losowe, średnie, zmienne losowe, fluktuacje. Gęstość stanów. Zespoły statystyczne. Prawo rozkładu Boltzmana. Ekwipartycja energii. Funkcja rozdziału i jej związek z właściwościami układu. Energia, entropia, energia swobodna i ich interpretacja molekularna. Entropia a teoria informacji. Proste zastosowania mechaniki statystycznej: ciało doskonale czarne, kryształy. Układy wielu cząstek: statystyka Bose-Einsteina i Fermiego-Diraca. Funkcje rozdziału gazów nieoddziałujących atomów, cząsteczek dwuatomowych i cząsteczek wieloatomowych. Obliczenie funkcji termodynamicznych substancji w fazie gazowej. Obliczenia stałych równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej. Gazy niedoskonałe: diagramy Mayera. Ciecze: radialne funkcje rozkładu i potencjały średniej siły. Statystyczno-mechaniczna teoria reprezentacji gruboziarnistych układów. Mechanika statystyczna a symulacje molekularne.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Mechanika kwantowa, chemia fizyczna, algebra liniowa, analiza matematyczna.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Zestaw zadań do samodzielnego rozwiązania	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>D. McQuarrie: Statistical Mechanics</li> <li>R. Leach: Molecular Modeling: Principles and Applications</li> </ol>	
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>K. Huang, Statistical Mechanics</li> <li>F. Reif, Statistical Mechanics</li> <li>R.P. Feynman, Lectures in Statistical Mechanics</li> </ol>	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>1. There are two apples and two oranges in a box. Somebody took a fruit from that box at random. What is the probability that we get an orange when taking another fruit at random?</p> <p>2. To what temperature would gaseous oxygen in the ground triplet state (<math>^3\text{g}</math>, degeneracy 3) have to be heated to get 0.1 % of it excited to the singlet (<math>1\text{g}</math>, degeneracy 1) state? Singlet oxygen has energy by 21 kcal/mol higher than triplet oxygen</p> <p>3. The partition coefficient of terminally-blocked L-methionine (Ac-L-Met-NHMe) between n-octanol (n-oct) and water (wat) at <math>t = 25\text{ C}</math> is equal to <math>P = x_{\text{noct}}/x_{\text{wat}} = 0.25</math>, where <math>x_{\text{noct}}</math> and <math>x_{\text{wat}}</math> denote the molar fractions of L-methionine in the n-octanol and water phase, respectively (data from Fauchère and Pliska, Eur. J. Med. Chem., 18, 369-375, 1983). Determine the difference of the chemical potentials of L-methionine in the two phases (<math>x_{\text{noct}}</math> wat) at <math>t = 25\text{ C}</math>.</p> <p>4. Demonstrate that the grand partition function of a system of non-interacting fermions with two energy levels with energies <math>e_1</math> and <math>e_2</math> can be expressed as <math>= [1 + \exp(-\beta e_1)] [1 + \exp(-\beta e_2)]</math></p> <p>5. Calculate the mole fractions of lithium (Li) atoms in the first and in the second excited state at its boiling temperature (<math>t = 1330\text{ C}</math>). The degeneracy of the ground electronic state (term <math>^2\text{S}_{1/2}</math>) is <math>g_0 = 2</math>, while the degeneracies and the excitation energies of the first and the second excited states (terms <math>^2\text{P}_{1/2}</math> and <math>^2\text{P}_{3/2}</math>, respectively), are <math>g_1 = 2</math>, <math>\epsilon_1 = 1.85\text{ eV}</math> and <math>g_2 = 4</math>, <math>\epsilon_2 = 1.85\text{ eV}</math>, respectively.</p>
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.