

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia teoretyczna (Ćw. audytoryjne), PG_00054402						
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		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski brak uwag		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej						
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	0.0	45.0	0.0	0.0	0.0	45
	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	45		8.0		22.0	75
Cel przedmiotu	Nabycie przez studentów umiejętności obliczania parametrów geometrycznych cząsteczek, znajdowania punktów krytycznych na hiperpowierzchni energii potencjalnej, prostych obliczeń z użyciem mechaniki molekularnej, obliczania częstości drgań prostych cząsteczek, określania na podstawie prawa rozkładu Boltzmanna średniej energii, pojemności cieplnej, ciśnienia i innych wielkości fizycznych, obliczania wielkości termodynamicznych gazów atomowych oraz cząsteczek sprężystych oraz obliczania stałych równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	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.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student dowiaduje się, że prowadzenie obliczeń dla układów molekularnych wymaga połączenia i odpowiednie skojarzenie wiedzy z dziedziny chemii organicznej, nieorganicznej, fizycznej i kwantowej oraz umiejętności posługiwania się aparatem algebry liniowej i analizy matematycznej przynajmniej na poziomie podstawowym. Student skutecznie identyfikuje braki w swojej wiedzy oraz wie jak swoją wiedzę uzupełnić i poszerzyć.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student stosuje metody geometrii analitycznej, algebry liniowej i analizy matematycznej stosowane w modelowaniu molekularnym i mechanice statystycznej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student prawidłowo dobiera metody matematyczne, które należy zastosować do rozwiązania danego zagadnienia chemii teoretycznej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student poznaje metody geometrii analitycznej, algebry liniowej i analizy matematycznej stosowane w modelowaniu molekularnym i mechanice statystycznej.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
Treści przedmiotu	Opis geometrii cząsteczki. Współrzędne kartezyjskie 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. Drgania normalne cząsteczek. Mechanika statystyczna: 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. 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.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	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 Schroedingera dla prostych układów (cząstka swobodna w pudle, rotator sztywny, oscylator harmoniczny), termów atomowych, posługiwania się funkcjami termodynamicznymi (diagram Gibbsa).		

Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	kartkówki (10)	51.0%	20.0%
	aktywność w czasie ćwiczeń autorytarynych	51.0%	5.0%
	kolokwium (2)	51.0%	75.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	N. A. Smirnowa, Elementy termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, PWN.	
	Uzupełniająca lista lektur	1. D. McQuarrie: Statistical Mechanics 2. K. Gumiński, P. Petelenz, Elementy chemii teoretycznej 3. R. Leach: Molecular Modeling: Principles and Applications 4. H. Buchowski, Elementy termodynamiki statystycznej 5. K. Huang, Mechanika statystyczna 6. F. Reif, Mechanika statystyczna 7. R.P. Feynman, Wykłady z mechaniki statystycznej	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>1. Energię potencjalną cząsteczki bifenylu Ph-Ph w zależności od długości wiązania C-C (d) wyrażonej w angstromach oraz kąta torsyjnego obrotu wokół tego wiązania (θ) można w przybliżeniu opisać równaniem:</p> $E(d, \theta) = 317(d - 1,45)^2 + 1,5[1 - \cos(2\theta)]$ <p>Znaleźć punkty krytyczne oraz określić ich typ (minimum, maksimum, punkt siodłowy) na tej hiperpowierzchni energii potencjalnej, traktując d i θ jako zmienne. Kąt θ zawiera się w przedziale $[-180^\circ, 180^\circ]$.</p> <p>2. Obliczyć siłę działającą na każdy z atomów w cząsteczce bromu oraz podać zwroty tych sił w stosunku do środka wiązania Br-Br jeżeli długość wiązania Br-Br wynosi 2,33 Å. Równowagowa długość wiązania Br-Br wynosi $d^0 = 2,28$ Å a liczba falowa drgań cząsteczki $^{79}\text{Br}_2$ wynosi 322 cm^{-1}.</p> <p>3. W wyniku nitrowania chlorobenzenu w temperaturze $t=101^\circ\text{C}$ otrzymano tyle samo p-nitrochlorobenzenu (p) i o-nitrochlorobenzenu (o). Nie stwierdzono obecności innych produktów reakcji. Zakładając, że reakcja nitrowania podlega kontroli termodynamicznej obliczyć różnicę energii pomiędzy formą orto i formą para ($e_o = e_p$) i wyprowadzić wzór na zależność zawartości formy orto w mieszaninie poreakcyjnej od temperatury.</p> <p>4. Określić wkłady do pojemności cieplnej 1 mola atomowego złota (Au) w fazie gazowej, wyprowadzić wzory na te wkłady w zależności od temperatury (jeżeli takowa występuje) oraz obliczyć ich wartości w temperaturze $t=2927^\circ\text{C}$ (powyżej temperatury wrzenia tego metalu). Degeneracja poziomu podstawowego wynosi $w_0=2$ (term $^2S_{1/2}$) a degeneracja i względna energia pierwszego stanu wzbudzonego wynosi odpowiednio $w_1=6$, $e_1=109,6 \text{ kJ/mol}$ (term $^2D_{5/2}$). Energie wyższych stanów wzbudzonych są na tyle wysokie, że stany te można zaniedbać w sumie statystycznej.</p> <p>5. Dana jest reakcja tworzenia 1 mola gazowego chlorku bromu z 1/2 mola gazowego chloru cząsteczkowego i 1/2 mola gazowego bromu cząsteczkowego:</p> $1/2 \text{ } ^{79}\text{Br}_2 + 1/2 \text{ } ^{35}\text{Cl}_2 = \text{ } ^{79}\text{Br}^{35}\text{Cl}$ <p>Napisać wyrażenia na zmianę energii translacyjnej, rotacyjnej, oscylacyjnej i elektronowej w wyniku zajścia tej reakcji.</p>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.