

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia teoretyczna (Wykład), PG_00054401						
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			egzamin		
Jednostka prowadząca	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 teoretycznych modelowania molekularnego, w tym mechaniki i dynamiki molekularnej oraz metod Monte Carlo, prawa rozkładu Boltzmann'a i jego zastosowań oraz podstaw mechaniki statystycznej i jej zastosowań w chemii.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[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 oraz analizy matematycznej w modelowaniu molekularnym oraz mechanice statystycznej w chemii.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student dobiera właściwą metodologię do rozwiązywania zagadnień modelowania molekularnego oraz zastosowań mechaniki statystycznej w chemii.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
	[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/diskusja [SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student poznaje podstawy numerycznego znajdowania minimów i punktów siodłowych na hiperpowierzchni energii potencjalnej oraz metod numerycznego całkowania równań ruchu.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja
[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student stosuje wiedzę z chemii kwantowej i matematyki w analizie powierzchni energii potencjalnej cząsteczek, wiedzę z chemii, fizyki i matematyki do modelowania molekularnego oraz stosowania prawa rozkładu Boltzmanna do opisu układów chemicznych.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	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.		
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, posługiwanie się funkcjami termodynamicznymi (diagram Gibbsa).		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	kartkówki przed wykładem	51.0%	10.0%
	egzamin	51.0%	90.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	N.A. Smirnowa: Metody termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej.	
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 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	Adresy na platformie eNauczenie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ile współrzędnych kartezjańskich a ile wewnętrznych należy podać do określenia geometrii cząsteczki aminobenzenu (aniliny)? Wyjaśnić, dlaczego liczby tych rodzajów współrzędnych są różne. 2. Jakie wkłady do energii występują w polu siłowym dla (a) cząsteczki metanu (CH_4) (b) cząsteczki etanolu. Odpowiedzi uzasadnić. 3. Ile drgań normalnych występuje dla następujących cząsteczek: H_2O, HCN, CH_4, C_3O_2 (podtlenek węgla; $\text{O}=\text{C}=\text{C}=\text{O}$)? Odpowiedź uzasadnić. 4. Wykorzystując prawo rozkładu Boltzmanna wyjaśnić, dlaczego zwiększenie temperatury zwiększa rozpuszczalność większości soli w wodzie i dlaczego w przypadku niektórych soli (np. octanu wapnia) ma miejsce sytuacja odwrotna. 5. Dana jest następująca reakcja wymiany izotopowej (D oznacza deuter, ^2H): $\text{CD}_4 + \text{HCl} = \text{CD}_3\text{H} + \text{DCI}$ Które wkłady do energii tej reakcji (translacyjny, rotacyjny, oscylacyjny, elektronowy) są niezerowe? Które wkłady musimy uwzględnić, aby obliczyć stałą równowagi tej reakcji? Odpowiedź uzasadnić. Zakładamy, że do obliczania sum statystycznych można stosować przybliżenie wysokotemperaturowe (statystyka boltzmannowska). 	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.