



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	FIZYKA CHEMICZNA, PG_00048936						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2022/2023				
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki				
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski				
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS	4.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	egzamin				
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. inż. Jan Zielkiewicz					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
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	60	10.0	30.0	100		
Cel przedmiotu	Poznanie podstawowych praw rządzących procesami fizycznymi i chemicznymi						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu				
	[K7_W02] ma uporządkowaną, poszerzoną wiedzę związaną ze współczesną chemią, obejmującą właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń i rozwiązywania problemów technicznych, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność	Rozwiązując problemy fizyczne, student zdolny jest stosować metody teorii prawdopodobieństwa i odpowiednie narzędzia matematyczne do opisu złożonych, wielocząsteczkowych układów.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym				
	[K7_W05] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie fizyki, obejmującą zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędną do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania rozmaitych problemów technicznych w tym pracy z takimi urządzeniami jak mikroskopy elektronowe.	Zrozumienie pochodzenia i istoty jednego z najbardziej podstawowych praw przyrody: II zasady termodynamiki.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym				
[K7_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, również w języku angielskim, potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie,	umiejętność krytycznej oceny źródeł informacji dostępnych w literaturze	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji					

Treści przedmiotu	<p>1. Podstawowe idee termodynamiki statystycznej.</p> <p>Teoria kinetyczna gazów. Przykład zastosowania: przewodnictwo cieplne gazu doskonałego. Rozkład cząsteczek w pudle rozważania kombinatoryczne. Pojęcia stanu mikroskopowego i stanu makroskopowego układu, zasada maksymalnego prawdopodobieństwa. Intuicyjna definicja entropii statystycznej Boltzmanna: $S = k \ln W$. Gaz doskonały jako układ dynamiczny potrzeba nowego sposobu opisu, opartego na prawach mechaniki. Równania ruchu mechaniki klasycznej, wykazanie szczególnych zalet opisu mechaniki układu przy wykorzystaniu równań kanonicznych Hamiltona. Pojęcie przestrzeni fazowej i pojęcie zespołu statystycznego Gibbsa. Twierdzenie Liouville'a i model hydrodynamiczny przestrzeni fazowej. Zespół mikrokanoniczny, entropia gazu doskonałego, paradoks Gibbsa, problem wyznaczenia absolutnych wartości entropii, powiązania z koncepcjami teorii kwantowej (nieodróżnialność cząstek, zasada nieoznaczoności, stała Plancka). Absolutna entropia statystyczna gazu doskonałego: równanie Sackur-Tetrode. Zespół kanoniczny Gibbsa, rozkład gęstości punktów w przestrzeni fazowej, rozkład Maxwella-Boltzmanna. Energia swobodna i entropia w zespole kanonicznym, fluktuacje energii w zespole kanonicznym. Wielki zespół kanoniczny, fluktuacje liczby cząstek w wielkim zespole kanonicznym, równoważność zespołu kanonicznego i wielkiego zespołu kanonicznego. Statystyki kwantowe (Fermiego-Diraca i Bosego-Einsteina), przykłady zastosowania: gaz elektronów swobodnych w metalu, kondensacja Bosego-Einsteina.</p> <p>2. Ilustracja zastosowań teorii statystycznej.</p> <p>Ciepło właściwe gazu doskonałego, ciepło właściwe ciał stałych, rozszerzalność cieplna ciał stałych, adsorpcja. Zjawisko dyfuzji, model błędzenia przypadkowego, równanie dyfuzji. Opis zjawiska paramagnetyzmu: model Curie-Weissa i przejście fazowe II rodzaju w punkcie Curie. Podstawy fizyki związków wielkocząsteczkowych: model błędzenia przypadkowego w opisie struktury kłębaka statystycznego formowanego przez łańcuch polimeru, siły entropowe (źródło, opis, występowanie), właściwości termodynamiczne roztworów polimerów model Flory'ego i Hugginsa.</p> <p>3. Podstawy metod modelowania molekularnego</p> <p>Modele oddziaływań międzycząsteczkowych, uwzględnienie więzów. Obcięcie potencjału oddziaływań na dużych odległościach. Problem granic układu, periodyczne warunki brzegowe. Dynamika molekularna, numeryczne rozwiązywanie równań ruchu opis stosowanych algorytmów. Różne warunki prowadzenia symulacji: NVT lub NpT. Symulacje Monte Carlo, algorytm Metropolis. Równoważność dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo. Metody analizy rezultatów: struktura cieczy, funkcje rozkładu radialnego, czasowe funkcje korelacji, analiza spektralna funkcji korelacji, dyfuzja, analiza konformacyjna białek (wykres Ramachandrana).</p>								
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka, Fizyka, Chemia Fizyczna								
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1"> <tr> <td>Sposób oceniania (składowe)</td> <td>Próg zaliczeniowy</td> <td>Składowa oceny końcowej</td> </tr> <tr> <td>egzamin</td> <td>55.0%</td> <td>100.0%</td> </tr> </table>	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	egzamin	55.0%	100.0%		
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej							
egzamin	55.0%	100.0%							
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. J. Stecki <i>Termodynamika statystyczna</i>. 2. A. J. Anselm <i>Podstawy fizyki statystycznej i termodynamiki</i>. 3. N. A. Smirnowa <i>Metody termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej</i>. 4. L. D. Landau, E. M. Lifszyc <i>Fizyka statystyczna</i>. 5. M. Łopuszański, B. Pawlikowski <i>Fizyka statystyczna</i>. 6. K. Huang <i>Mechanika statystyczna</i>. 7. T. Hill <i>Introduction to statistical thermodynamics</i>. 8. D. McQuarrie <i>Statistical thermodynamics</i>. 							

	Uzupełniająca lista lektur	<p>1. W. Rubinowicz, W. Królikowski <i>Mechanika teoretyczna</i>.</p> <p>2. G. Białkowski <i>Mechanika klasyczna</i>.</p>
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Proszę omówić następujące pojęcia: stan mikroskopowy i stan makroskopowy układu, intuicyjna definicja entropii Boltzmanna $S=k\ln W$.</p> <p>Proszę omówić następujące pojęcia: zespół statystyczny Gibbsa dla układu izolowanego i rozmieszczenie punktów-obrazów zespołu statystycznego w przestrzeni fazowej.</p> <p>Proszę wyprowadzić równanie Sackur-Tetrode jako ostateczną postać wyrażenia na entropię statystyczną gazu doskonałego.</p>	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	