



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	FIZYKOCHEMIA MOLEKULARNA ROZTWORÓW, PG_00064404						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	3		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	5		Liczba punktów ECTS		2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Maciej Śmiechowski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	15.0	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		2.0		18.0	50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z molekularnymi podstawami zjawisk fizykochemicznych towarzyszących powstawaniu roztworów.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K6_U03] obsługuje typową aparaturę laboratoryjną i przeprowadza analizy pozwalające na identyfikację związków chemicznych i materiałów, integrując metody obliczeniowe i oprogramowanie użytkowe	potrafi przeprowadzić symulacje metodą dynamiki molekularnej lub metodą Monte Carlo celem przewidzenia struktury i własności fizykochemicznych roztworów.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU1] Ocena realizacji zadania
	[K6_U01] pozyskuje informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, dokonując ich interpretacji, krytycznej oceny, podsumowania, formułowania i uzasadnia opinie, samodzielnie analizuje i wykonuje rysunki techniczne z zastosowaniem wspomagania komputerowego	potrafi powiązać obserwowane makroskopowe własności rozpuszczalników różnego typu stosowanych w procesach technologicznych z ich strukturą molekularną i mikroskopowymi własnościami fizycznymi.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K6_W03] wykazuje się wiedzą w obszarze chemii teoretycznej i dyscyplin inżynierskich z nią powiązanych, niezbędną do przewidywania struktur, projektowania i prowadzenia podstawowych operacji procesów technologicznych za pomocą narzędzi mechaniki molekularnej	zna podstawy mechaniki molekularnej, w tym dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo, w wymiarze niezbędnym do prowadzenia symulacji komputerowych z zakresu fizykochemii roztworów.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K6_W05] rozpoznaje metody, techniki i narzędzia komputerowego wspomagania projektowania do rozwiązywania zadań inżynierskich z zakresu chemii, inżynierii i technologii chemicznej, maszynoznawstwa, w projektowaniu i analizie procesów technologicznych	zna i potrafi obsługiwać wybrane programy z otwartym kodem źródłowym służące prowadzeniu symulacji metodami dynamiki molekularnej i Monte Carlo oraz analizie uzyskanych wyników.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład Powtórzenie z termodynamiki fenomenologicznej: warunki spontaniczności i równowagi, zasady termodynamiki, potencjały termodynamiczne, równanie Gibbsa-Duhema, wielkości cząstkowe, wielkości pozorne; Powtórzenie wiadomości z probabilistyki: prawdopodobieństwo, prawo wielkich liczb, zmienne losowe dyskretne i ciągłe, miary położenia i rozproszenia, rozkłady prawdopodobieństwa, rozkład normalny, centralne twierdzenie graniczne; Podstawy klasycznej termodynamiki statystycznej: przestrzeń fazowa, gęstość stanów, twierdzenie Liouvillea, zespół mikrokanoniczny, kanoniczny, wielki kanoniczny, suma stanów, hipoteza ergodyczna, fluktuacje równowagowe; Teoria molekularna roztworów: funkcje dystrybucji, teoria Kirkwooda-Buffa; Teoria solwatacji i solwatacja preferencyjna; Własności dynamiczne: teoria odpowiedzi liniowej, funkcje korelacji, relacje Green-Kubo.		
	Treści przedmiotu - laboratoria Ćwiczenia komputerowe z zakresu dynamiki molekularnej roztworów: 1. Solubilizacja hydrotropowa w układzie dwufazowym woda-chloroform przy pomocy etanolu 2. Wyznaczanie objętości molowej cieczy jonowych w rozpuszczalnikach molekularnych 3. Wyznaczanie indukowanego momentu dipolowego jonów halogenowych w rozpuszczalnikach polarnych		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczone przedmioty: Matematyka, Fizyka, Chemia fizyczna, Chemia teoretyczna		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Sprawdzian końcowy z wykładów	50.0%	50.0%
	Sprawozdania z ćwiczeń laboratoryjnych	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	K. Zalewski, Wykłady z mechaniki i termodynamiki statystycznej dla chemików, PWN, Warszawa, 1982. N. A. Smirnowa, Metody termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, PWN, Warszawa, 1980.	
	Uzupełniająca lista lektur	H. Buchowski, Elementy termodynamiki statystycznej, WNT, Warszawa 1998. A. Ben-Naim, Molecular Theory of Solutions, Oxford University Press, New York, 2006. D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, New York, 1976. M. E. Tuckerman, Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation, Oxford University Press, New York, 2010.	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Podaj związek pojemności cieplnej układu z fluktuacjami energii. Podaj związek ściśliwości izotermicznej układu z fluktuacjami liczby cząstek. Podaj treść hipotezy ergodycznej. Omów pojęcie aktywności w sensie termodynamiki statystycznej. Podaj sens fizyczny radialnej funkcji rozkładu oraz jej związek z liczbą cząstek w zadanej odległości. Podaj definicję całki Kirkwooda-Buffa. Podaj definicję energii swobodnej solwatacji wg Ben-Naima. Zdefiniuj pojęcie solwatacji preferencyjnej. Udowodnij, że wzór Einsteina na współczynnik dyfuzji i odpowiednia relacja Green-Kubo są wzajemnie powiązane.
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.