

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Chemia teoretyczna (C-AC.II2-ChTeor)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Theoretical chemistry

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Chemii

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Opis:

Treści realizowane w ramach przedmiotu podzielone są na dwa działy: mechanika statystyczna i zaawansowane metody chemii kwantowej.

Egzamin odbywa się na zakończenie kursu w semestrze letnim.

Wykład obejmuje następujące zagadnienia:

1. Podstawy termodynamiki statystycznej.
2. Metoda zespołów statystycznych Gibbsa.
3. Postulaty termodynamiki statystycznej.
4. Zespoły statystyczne.
5. Rozkład Maxwella-Boltzmanna. Statystyki kwantowe.
6. Zespół kanoniczny i wielki kanoniczny.
7. Zastosowania termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej.
8. Zaawansowane metody obliczeniowe chemii kwantowej: HF, HFR, metoda zaburzeń Moellera-Plesseta. Zastosowania.

Laboratorium obejmuje następujące zagadnienia:

1. Opis teoretyczny izoterm adsorpcji z fazy gazowej
2. Symulacja Monte Carlo izoterm adsorpcji w układzie ciało stałe-gaz.
3. Termodynamiczny opis agregacji surfaktantów w roztworach wodnych: wyznaczanie CMC, średniej liczby agregacji i rozkładu agregatów wg rozmiarów
4. Optymalizacja geometrii molekuł
5. Obliczanie i interpretacja widm w podczerwieni dla wybranej struktury molekularnej
6. Obliczanie i interpretacja widm NMR

Literatura:

Literatura podstawowa:

1. K. Gumiński, P. Petelenz, Elementy chemii teoretycznej, PWN Warszawa 1989.
2. N. Smirnowa, Metody termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, PWN Warszawa 1980.
3. M.H. Everdell, Statistical Mechanics and its Chemical Applications, Academic Press Inc 1975.
4. A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern quantum chemistry, introduction to advanced electronic structure theory Dover Publications, New York 1989.
5. D.B. Cook, Handbook of computational chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998
6. L. Piel, Idee chemii kwantowej, PWN Warszawa 2003.
7. J. Ościk, Adsorpcja, PWN, Warszawa 1983

Literatura uzupełniająca:

1. D.W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997
2. Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN, Warszawa 1998
3. R.F. Nalewajski, Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady, PWN, Warszawa 2001
4. T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, Addison-Wesley Publishing Company, New York 1960.

Efekty uczenia się:

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:

WIEDZA

W1. Zna matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia i opisu w języku

matematyki problemów w wybranych działach chemii (K_W02)

W2. Zna podstawy termodynamiki statystycznej i metod symulacji komputerowych oraz współczesne metody obliczeniowe (K_W09)

UMIEJĘTNOŚCI

U1. Potrafi interpretować właściwości ciał stałych, cieczy i gazów (K_U04)

U2. Potrafi obliczać funkcje termodynamiczne gazu doskonałego (K_U05)

U3. Umie opisać, również ilościowo, szereg ważnych zjawisk powierzchniowych i międzyfazowych (K_U07)

KOMPETENCJE SPOŁECZNE

K1. Zna ograniczenia własnej wiedzy i rozumie konieczność dalszego kształcenia jak również potrafi inspirować proces uczenia się szczególnie przedmiotów przyrodniczych (K_K01)

K2. Potrafi pracować zespołowo. (K_K02)

K3. Potrafi formułować zagadnienia służące dalszemu pogłębianiu jego wiedzy (K_K03)

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXIV – 18.23/18 z dnia 27 czerwca 2018 r. tj. od cyklu kształcenia 2018/2019

WIEDZA

W1. absolwent zna i rozumie w pogłębiony sposób wybrane fakty, teorie i zjawiska oraz metody z zakresu chemii teoretycznej (K_W01)

W2. absolwent zna i rozumie podstawy teoretyczne z chemii, ma uporządkowaną wiedzę obejmującą kluczowe zagadnienia i główne trendy w chemii (K_W02)

UMIEJĘTNOŚCI

U1. absolwent potrafi zastosować zdobytą wiedzę w zakresie chemii do pokrewnych dziedzin nauki (K_U01)

U2. absolwent potrafi formułować i rozwiązywać złożone i nietypowe problemy z chemii teoretycznej poprzez właściwy dobór źródeł oraz informacji z nich pochodzących. (K_U02)

KOMPETENCJE SPOŁECZNE

K1. absolwent jest gotów do krytycznej oceny odbieranych treści i uznawania znaczenia wiedzy chemicznej w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych (K_K03)

Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS

Godziny kontaktowe (z udziałem nauczyciela akademickiego):

Wykład 30h

Laboratorium 30h

Łączna liczba godzin z udziałem nauczyciela akademickiego 60h

Liczba punktów ECTS z udziałem nauczyciela akademickiego 2,0

Godziny niekontaktowe (praca własna studenta)

Przygotowanie się do konwersatorium 20h

Studiowanie literatury 10h

Przygotowanie się do egzaminu 10h

Łączna liczba godzin niekontaktowych 20h

Liczba punktów ECTS za godziny niekontaktowe 2,0

Sumaryczna liczba punktów ECTS dla modułu 4,0

Sposób weryfikacji efektów kształcenia

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:

W1-W2, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne),

U1-U3, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne),

K1-K3, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne).

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXIV – 18.23/18 z dnia 27 czerwca 2018 r. tj. od cyklu kształcenia 2018/2019

W1-W2, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne),

U1-U2, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne),

K1, wykład (egzamin pisemny), konwersatorium (ocena ciągła lub kolokwia śródsesestralne).

Wymagania wstępne

Podstawy matematyki, fizyki, termodynamiki fenomenologicznej i chemii kwantowej.

Punkty przedmiotu w cyklach:

<bez przypisanego programu>			
Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	4	14/15L	