

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Specialization lecture: Statistical mechanics in chemistry (Wykład), PG_00117810						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> 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 mechaniki statystycznej oraz jej zastosowań w chemii.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizację zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student stosuje metody mechaniki statystycznej do rozwiązywania problemów chemicznych.	[SK5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U11] Komunikuje się w języku obcym na poziomie B2+ Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego oraz potrafi posługiwać się specjalistyczną terminologią.	Student zapoznaje się z anglojęzyczną terminologią z dziedziny mechaniki statystycznej.	[SU5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student poznaje zastosowanie mechaniki statystycznej do opisu układów i zjawisk chemicznych na poziomie średniozaawansowanym i stosuje odpowiednie metody analizy matematycznej oraz algebry liniowej.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student stosuje metody mechaniki statystycznej do rozwiązywania problemów chemicznych.	[SU5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student stosuje odpowiednie metody analizy matematycznej oraz algebry liniowej.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
Treści przedmiotu	[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 [SK5] realizacja zadania problemowego
	Geometria i hiperpowierzchnia energii cząsteczki, prawdopodobieństwo, zmienne losowe, średnie, zmienne losowe, fluktuacje. Gęstość stanów. Zespoły statystyczne. Prawo rozkładu Boltzmann. Ekwipartycja energii. Funkcja rozdziału i jej związek z właściwościami układu. Energia, entropia, energia swobodna i ich interpretacja molekularna. Entropia a teoria informacji. Proste zastosowania mechaniki statystycznej: ciało doskonale czarne, kryształy. Układy wielu cząstek: statystyka Bose-Einsteina i Fermiego-Diraca. Funkcje rozdziału gazów nieoddziałujących atomów, cząsteczek dwuatomowych i cząsteczek wieloatomowych. Obliczenie funkcji termodynamicznych substancji w fazie gazowej. Obliczenia stałych równowag reakcji chemicznych w fazie gazowej. Gazy niedoskonałe: diagramy Mayera. Ciecze: radialne funkcje rozkładu i potencjały średniej siły. Statystyczno-mechaniczna teoria reprezentacji gruboziarnistych układów. Mechanika statystyczna a symulacje molekularne.		
	Mechanika kwantowa, chemia fizyczna, algebra liniowa, analiza matematyczna.		
	Wymagania wstępne i dodatkowe		
	Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy
		Zestaw zadań do samodzielnego rozwiązania	Składowa oceny końcowej
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur		1. D. McQuarrie: Statistical Mechanics 2. R. Leach: Molecular Modeling: Principles and Applications
	Uzupełniająca lista lektur		1. K. Huang, Statistical Mechanics 2. F. Reif, Statistical Mechanics 3. R.P. Feynman, Lectures in Statistical Mechanics
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. There are two apples and two oranges in a box. Somebody took a fruit from that box at random. What is the probability that we get an orange when taking another fruit at random? 2. To what temperature would gaseous oxygen in the ground triplet state (^3g, degeneracy 3) have to be heated to get 0.1 % of it excited to the singlet (1g, degeneracy 1) state? Singlet oxygen has energy by 21 kcal/mol higher than triplet oxygen 3. The partition coefficient of terminally-blocked L-methionine (Ac-L-Met-NHMe) between n-octanol (n-oct) and water (wat) at $t = 25\text{ C}$ is equal to $P = x_{\text{n-oct}}/x_{\text{wat}} = 0.25$, where $x_{\text{n-oct}}$ and x_{wat} denote the molar fractions of L-methionine in the n-octanol and water phase, respectively (data from Fauch`ere and Pliska, Eur. J. Med. Chem., 18, 369-375, 1983). Determine the difference of the chemical potentials of L-methionine in the two phases ($x_{\text{n-oct}}$ wat) at $t = 25\text{ C}$. 4. Demonstrate that the grand partition function of a system of non- interacting fermions with two energy levels with energies e_1 and e_2 can be expressed as $= [1 + \exp(-\beta e_1)] [1 + \exp(-\beta e_2)]$ 5. Calculate the mole fractions of lithium (Li) atoms in the first and in the second excited state at its boiling temperature ($t = 1330\text{ C}$). The degeneracy of the ground electronic state (term $^2\text{S}_{1/2}$) is $= 2$, while the degeneracies and the excitation energies of the first and the second excited states (terms $^2\text{P}_{1/2}$ and $^2\text{P}_{3/2}$, respectively), are $g_1 = 2$, $E_1 = 1.85\text{ eV}$ and $g_2 = 4$, $E_2 = 1.85\text{ eV}$, respectively.
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.