

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Theoretical chemistry</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2012
Specjalność:	materials chemistry
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Theoretical chemistry - konwersatorium
Rok/Semestr:	I/1
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	<b>Barczak Mariusz, dr</b>
Forma zajęć:	konwersatorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	zaawansowany
Wstępne wymagania:	Utrwalone wiadomości w zakresie matematyki i chemii fizycznej nabyte na wcześniejszych latach studiów.
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> <li>• objaśnienie lub wyjaśnienie</li> <li>• wykład konwersatoryjny</li> </ul>
Zakres tematów:	<p>Podczas konwersatorium powtarzane i rozwijane są zagadnienia z termodynamiki statystycznej omawiane podczas wykładów w zimowym semestrze. Rozwiązywane są zadania mające na celu wykorzystanie nabytej wiedzy do uświadomienia roli umiejętności teoretycznego opisu zjawisk zachodzących w przyrodzie. Zakres tematów:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Wprowadzenie do termodynamiki statystycznej. Postulaty termodynamiki statystycznej, Metoda zespołów statystycznych Gibbsa. Waga statystyczna elementów zespołu.</li> <li>2. Przestrzeń fazowa <math>\mu</math> i <math>\gamma</math>. Stan układu w przestrzeni <math>\mu</math> i <math>\gamma</math>: Stany mikro i makro, niedokładna znajomość stanu a metody statystyczne.</li> <li>3. Dokładne omówienie zespołów statystycznych (mikrokanoniczny, kanoniczny, grandkanoniczny), potencjał termodynamiczny.</li> <li>4. Zespół kanoniczny. Kanoniczna suma stanów i jej związki z funkcjami termodynamicznymi. Równanie stanu gazu doskonałego w zespole kanonicznym.</li> <li>5. Kryształy atomowe: Kryształ Einsteina, energia kryształu w niskich i wysokich temperaturach, pojemność cieplna, prawo Dulonga i Petita.</li> <li>6. Wyprowadzenie izotermy Langmuira i BET.</li> </ol>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> <li>• ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)</li> <li>• śródsesemestralne pisemne testy kontrolne</li> </ul>
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Notatki z wykładów.</li> <li>2. Kazimierz Gumiński, Piotr Petelenz, "Elementy chemii teoretycznej", PWN.</li> <li>3. Terrell L. Hill, "An Introduction to Statistical Thermodynamics", Dover Publications.</li> </ol>