

<b>Opis przedmiotu</b>			
Kod przedmiotu	1020-TC000-ISP-3012		
Nazwa przedmiotu	Chemia fizyczna 2		
	Physical Chemistry 2		
Wersja przedmiotu	2021/2022		
<b>A. Usytuowanie przedmiotu w systemie studiów</b>			
Poziom kształcenia	Studia I stopnia		
Forma i tryb prowadzenia studiów	Studia stacjonarne		
Kierunek studiów	Technologia Chemiczna		
Profil studiów	Ogólnoakademicki		
Specjalność	Przedmiot wspólny dla kierunku		
Jednostka prowadząca przedmiot	Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej		
Jednostka realizująca przedmiot (zlecenia międzywydziałowe)	Nie dotyczy		
Koordinator przedmiotu	Dr hab. inż. Aneta Pobudkowska-Mirecka, prof. uczelni		
<b>B. Ogólna charakterystyka przedmiotu</b>			
Przynależność do grupy/bloku przedmiotów	Przedmioty podstawowe		
Poziom przedmiotu	Poziom podstawowy		
Status przedmiotu	Przedmiot obowiązkowy		
Język prowadzenia zajęć	polski		
Usytuowanie przedmiotu w planie zajęć - semestr nominalny	3		
Usytuowanie realizacji przedmiotu w roku akademickim	semestr zimowy		
Wymagania wstępne - formalne	Zaliczona Matematyka 1 i 2 oraz Fizyka 1 i 2.		
Limit liczby studentów	Brak		
<b>C. Efekty uczenia się i sposób prowadzenia zajęć</b>			
Cel przedmiotu	<p>Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów ze zjawiskami zawartymi w następujących działach chemii fizycznej: kinetyka chemiczna, kataliza, zjawiska powierzchniowe, fotochemia, elektrochemia, chemia kwantowa. Przedmiot dostarcza informacji na temat ogólnych definicji i zasad opisywania zagadnień fizykochemicznych, zjawisk fizycznych towarzyszących przemianom chemicznym jak również opisem stanu kwantowego cząsteczki chemicznej. Celem ćwiczeń audytoryjnych jest zapoznanie z inżynierskimi, fizykochemicznymi obliczeniami zagadnień omawianych w programie wykładu. Celem laboratorium komputerowego jest zapoznanie studenta z praktycznymi aspektami metod obliczeniowych chemii kwantowej, których podstawy teoretyczne są omawiane w trakcie wykładu.</p>		
	<p>The aim of the course is to familiarize students with the phenomena contained in the following areas of physical chemistry: chemical kinetics, catalysis, surface phenomena, photochemistry, electrochemistry, quantum chemistry. The subject provides information on general definitions and principles of describing physicochemical issues, physical phenomena accompanying chemical transformations as well as the description of the quantum state of a chemical molecule. The aim of auditory exercises is to familiarize the student with engineering, physicochemical calculations of the issues discussed during the lecture. The purpose of the computer laboratory is to familiarize the student with the practical aspects of computational methods of quantum chemistry, whose theoretical basis is discussed during the lecture.</p>		
Efekty uczenia się (z podziałem na W, U i KS) wraz z odniesieniem do efektów uczenia się dla obszaru i kierunku			
<i>Nr efektu</i>	<i>Opis efektu</i>	<i>Odniesienie do charakterystyk efektów uczenia się</i>	<i>Odniesienie do efektów uczenia się w programie</i>
<b>Zakładane efektu uczenia się w zakresie wiedzy</b>			
W01	Posiada wiedzę z matematyki pozwalającą na posługiwanie się metodami matematycznymi.	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W01

	Has knowledge in mathematics to use mathematical methods.				
W02	Posiada ugruntowaną wiedzę ogólną z podstawowych działów chemii fizycznej. Zna najważniejsze kierunki chemii fizycznej oraz posiada umiejętność rozwiązywania problemów.	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W03		
	Has a well-established general knowledge of the basic areas of physical chemistry. Is familiar with the major branches of physical chemistry and has problem-solving skills.				
<b>Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności</b>					
U01	Posiada umiejętność korzystania ze źródeł literaturowych oraz zasobów internetowych dotyczących rozwiązywanego zadania.	I.P6S_UW.o I.P6S_UK III.P6S_UW.o	K_U01 K_U03		
	Has the ability to use literature sources and internet resources relevant to the task being solved.				
U02	Posiada umiejętność interpretacji i krytycznej dyskusji wyników prowadzonych badań, a także jest zdolny do wyciągania wniosków w celu modyfikacji wcześniej przyjętych założeń. Potrafi wykorzystać proste metody obliczeniowe, eksperymentalne i analityczne do formułowania i rozwiązywania problemów w zakresie technologii chemicznej.	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U10 K_U11		
	Has the ability to interpret and critically discuss the results of conducted research, and is able to draw conclusions in order to modify previously made assumptions. Can use simple calculation, experimental and analytical methods to formulate and solve problems in the field of chemical technology.				
U03	W oparciu o wiedzę ogólną wyjaśnia podstawowe zjawiska związane z istotnymi procesami w technologii i inżynierii chemicznej.	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U12		
	Based on general knowledge, explains basic phenomena related to relevant processes in chemical technology and engineering.				
U04	Rozróżnia typy reakcji chemicznych i posiada umiejętność ich doboru do realizowanych procesów chemicznych.	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U13		
	Distinguishes between types of chemical reactions and has the ability to select them for the chemical processes being carried out.				
U05	Potrafi scharakteryzować różne stany materii wykorzystując teorie używane do ich opisu.	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U14		
	Can characterise different states of matter using the theories used to describe them.				
U06	Przewiduje reaktywność związków chemicznych na podstawie ich budowy, szacuje efekty cieplne procesów chemicznych.	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U16		
	Predicts the reactivity of chemical compounds based on their structure, estimates the thermal effects of chemical processes.				
<b>Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych</b>					
KS01	Potrafi pracować samodzielnie studiując wybrane zagadnienie oraz wybierając najważniejsze elementy, jest gotów do podnoszenia kompetencji zawodowych.	I.P6S_KK	K_K01		
	Can work independently studying the selected issue and selecting the most important elements, is ready to improve professional competence.				
<b>Forma zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)</b>					
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt/laboratorium komputerowe	Seminarium
W planie tygodniowym	2	1	1		
W całym semestrze	30	15	15		

<p>Treści kształcenia – oddzielnie dla każdej z formy zajęć dydaktycznych</p>	<p><i>Wykład:</i></p> <p><b>Część I – chemia kwantowa</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Podstawy mechaniki kwantowej.</li> <li>2. Podstawowe modele chemii kwantowej</li> <li>3. Opis układu wielociałowego, przybliżenie adiabaticzne</li> <li>4. Elektronowe równanie Schrödingera dla układu wielociałowego</li> <li>5. Równanie Schrödingera dla jąder atomowych</li> <li>6. Metoda funkcjonału gęstości oraz metoda oddziaływania konfiguracji</li> </ol> <p><b>Część II – procesowa</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Podstawy kinetyki chemicznej.</li> <li>2. Podstawowe równania kinetyczne.</li> <li>3. Równania kinetyczne reaktorów chemicznych.</li> <li>4. Kinetyka reakcji złożonych.</li> <li>5. Mechanizm reakcji elementarnych, teorie szybkości reakcji.</li> <li>6. Kataliza i autokataliza.</li> <li>7. Kataliza heterogeniczna.</li> <li>8. Kinetyka reakcji jonowych i homogenicznych reakcji katalitycznych w roztworach.</li> <li>9. Reakcje enzymatyczne. Biokataliza.</li> <li>10. Fizykochemiczne podstawy farmakokinetyki.</li> <li>11. Procesy elektrochemiczne.</li> </ol> <p><i>Ćwiczenia:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mechanizm reakcji chemicznych. Szybkość reakcji chemicznej. Stopień przemiany. Podstawowe prawa kinetyki chemicznej. Metody wyznaczania rzędów reakcji.</li> <li>2. Reakcje rzędu zerowego, pierwszego, drugiego, n-tego. Rząd reakcji a stężenie. Wpływ temperatury na szybkość reakcji. Wyznaczanie stałych szybkości reakcji.</li> <li>3. Równania kinetyczne reakcji prostych i złożonych (równoległych, odwracalnych, następczych, łańcuchowych, autokatalitycznych).</li> <li>4. Mechanizm reakcji elementarnych – teorie szybkości reakcji: Arrheniusa, zderzeniowa, stanu przejściowego.</li> <li>5. Kataliza i autokataliza. Katalizatory, kataliza homogeniczna, reakcje autokatalityczne i oscylacyjne.</li> <li>6. Kinetyka reakcji katalitycznych na powierzchni jednorodnej.</li> <li>7. Kinetyka reakcji jonowych i homogenicznych reakcji katalitycznych w roztworach. Wpływ ładunków reagujących jonów na stałą szybkości. Reakcje o szybkości ograniczonej dyfuzją. Efekty solne w reakcjach jonowych. Kataliza kwasowo-zasadowa.</li> <li>8. Dynamika procesów elektrochemicznych.</li> </ol> <p><i>Laboratorium</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Wstęp do chemii obliczeniowej. Zapoznanie z podstawowymi funkcjami oraz możliwościami oprogramowania ORCA oraz Avogadro. Zastosowanie metody Hartree-Focka do obliczenia energii elektronowej molekuly. Optymalizacja geometrii cząsteczki chemicznej.</li> <li>2. Wykorzystanie obliczeń kwantowo-mechanicznych do badania właściwości cząsteczek chemicznych. Moment dipolowy, rozkład ładunków w cząsteczce, rząd wiązania. Korelacja właściwości kwasowych/zasadowych z energią deprotonacji/przyłączenia protonu.</li> <li>3. Orbitale molekularne. Poziomy HOMO i LUMO. Rozkład gęstości elektronowej w cząsteczce chemicznej, mapy potencjału elektrostatycznego. Lokalizacja orbitali molekularnych.</li> <li>4. Symulacja przejść elektronowych. Absorpcja i emisja promieniowania. Relaksacja geometrii w stanie wzbudzonym.</li> <li>5. Obliczenia częstości drgań i podstawowych funkcji termodynamicznych. Bilans entalpii i entalpii swobodnej przykładowej reakcji chemicznej (synteza amoniaku z wodoru i azotu).</li> <li>6. Zależność energii molekuly od konformacji. Skan energia-konformacja. Minima lokalne i minimum globalne na krzywej potencjału - interpretacja. Bariera rotacji a szybkość rotacji, układy z zahamowaną rotacją.</li> <li>7. Oddziaływanie międzycząsteczkowe. Wiązanie wodorowe. Energia wiązania wodorowego, zastosowanie teorii orbitali molekularnych w opisie wiązania wodorowego. Energia wiązania wodorowego a kwasowość/zasadowość donora/akceptora wiązania wodorowego.</li> </ol>
---	--

	<p><i>Lecture:</i></p> <p><b>Part I - quantum chemistry</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Basics principles of quantum mechanics</li> <li>2. Basic models of quantum chemistry</li> <li>3. Description of a many-body system, adiabatic approximation</li> <li>4. Electronic Schrödinger equation for a many-body system.</li> <li>5. Schrödinger equation for atomic nuclei.</li> <li>6. Density functional and configuration interaction methods</li> </ol> <p><b>Part II - process</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Fundamentals of chemical kinetics.</li> <li>2. Basic kinetic equations.</li> <li>3. Kinetic equations of chemical reactors.</li> <li>4. Kinetics of complex reactions.</li> <li>5. Mechanism of elementary reactions, reaction rate theories.</li> <li>6. catalysis and autocatalysis.</li> <li>7. Heterogeneous catalysis.</li> <li>8. Kinetics of ionic reactions and homogeneous catalytic reactions in solutions.</li> <li>9. enzymatic reactions. Biocatalysis.</li> <li>10. Physicochemical basis of pharmacokinetics.</li> <li>11. Electrochemical processes.</li> </ol> <p><i>Exercises:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mechanism of chemical reactions. Rate of chemical reaction. Rate of transformation. Basic laws of chemical kinetics. Methods of determining the orders of reactions.</li> <li>2. Reactions of zero, first, second, nth order. Order of reaction versus concentration. The effect of temperature on the rate of a reaction. Determination of reaction rate constants.</li> <li>3. Kinetic equations of simple and complex reactions (parallel, reversible, proceeding, chain, autocatalytic).</li> <li>4. Mechanism of elementary reactions - reaction rate theories: Arrhenius, collisional, transition state.</li> <li>5. catalysis and autocatalysis. Catalysts, homogeneous catalysis, autocatalytic and oscillatory reactions.</li> <li>6. Kinetics of catalytic reactions on homogeneous surface.</li> <li>7. Kinetics of ionic reactions and homogeneous catalytic reactions in solutions. Effect of charges of reacting ions on rate constant. Diffusion-limited rate reactions. Salt effects in ionic reactions. Acid-base catalysis.</li> <li>8. Dynamics of electrochemical processes.</li> </ol> <p><i>Laboratory</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Introduction to computational chemistry. Introduction to basic functions and capabilities of ORCA and Avogadro software. Application of Hartree-Fock method for calculation of electron energy of a molecule. Optimization of the geometry of a chemical molecule.</li> <li>2. Use of quantum mechanical calculations to study the properties of chemical molecules. Dipole moment, charge distribution in a molecule, bond order. Correlation of acid/base properties with deprotonation/protonation energy.</li> <li>3. Molecular orbitals. HOMO and LUMO levels. Distribution of electron density in a chemical molecule, electrostatic potential maps. Localization of molecular orbitals.</li> <li>4. Simulation of electron transitions. Absorption and emission of UV-Vis radiation. Geometry relaxation in excited state.</li> <li>5. Calculation of vibrational frequency and thermodynamic basis functions. Enthalpy and free enthalpy calculations for an example chemical reaction (synthesis of ammonia from hydrogen and nitrogen).</li> <li>6. Energy-conformation dependence. Local minima and global minima. Rotation barrier, rotation rate, systems with partially hampered rotation.</li> <li>7. Intermolecular interactions. Hydrogen bonding. Energy of hydrogen bonding, application of the molecular orbital in the description of hydrogen bonding. Hydrogen bond energy and acidity/basicity of hydrogen bond donor/acceptor.</li> </ol>
Metody kształcenia	<p><i>Wykład:</i> Wykład z prezentacją multimedialną</p> <p><i>Ćwiczenia:</i> Rozwiązywanie zadań.</p> <p><i>Laboratorium:</i> Rozwiązywanie problemów z wykorzystaniem komputera</p>

Metody sprawdzania efektów uczenia się (dla każdej pozycji efektów uczenia się, w tym, dla umiejętności odwołanie do konkretnych zadań projektowych, laboratoryjnych itp.)	
Nr efektu	Sposób sprawdzania
Zakładane efekty uczenia się w zakresie wiedzy	
W01	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
W02	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności	
U01	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
U02	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
U03	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
U04	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
U05	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
U06	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych	
KS01	kolokwium pisemne, egzamin pisemny
Metody oceny	<ol style="list-style-type: none"> <li>Ocena za przedmiot jest zintegrowana i jest średnią arytmetyczną wyniku z laboratorium/ćwiczeń (40%) i oceny za egzamin (60%). Punkty zaliczeniowe z laboratorium/ćwiczeń otrzymuje się za 2 kolokwia (jedną z części kwantowej i jedna z części procesowej). Warunkiem koniecznym uzyskania zaliczenia jest zdobycie z każdej części (kwantowej i procesowej) 25% oraz 50% (50 punktów) z całości. Liczbę punktów za przedmiot uzyskuje się sumując punkty procentowe za obie części. W następujący sposób punktacja ta przenosi się na oceny:  &lt; 50 % - nzał  [50 - 60) - dst  [60 - 70) - dst 1/2  [70 - 80) - db  [80 - 90) - db 1/2  [90 – 100) – bdb</li> <li>W przypadku uzyskania wyniku bliskiego 45 %, możliwy jest egzamin ustny <b>o ile zasady epidemiczne dopuszczą możliwość jego przeprowadzenia w formie stacjonarnej</b>. Dokładna wartość minimum kwalifikującego będzie każdorazowo określana w czasie egzaminu.</li> <li>Nie wprowadza się żadnych minimów punktowych dopuszczających do egzaminu.</li> </ol>
Egzamin	Tak
Literatura	<u>Literatura podstawowa:</u> [1] P.W. Atkins, Chemia fizyczna, Wyd. Naukowe PWN, Warszawa, 2007. [2] T. W. Herman, Chemia fizyczna, Wydawnictwo Lekarskie PZWL, Warszawa, 2007. [3] A. Kiswa, Elektrochemia. Elektrodyka II, wykłady z chemii fizycznej, WNT, Warszawa, 2001. [4] A. Molski, Wprowadzenie do kinetyki chemicznej, WNT, Warszawa, 2001. [5] K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia fizyczna, Podstawy fenomenologiczne t. I, Wyd. Naukowe PWN SA, Warszawa, 2007. [6] W. Kołos: Chemia Kwantowa, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1976. [7] L. Piela: Idee Chemii Kwantowej, Wyd. Naukowe PWN, Warszawa, 2007. <u>Literatura uzupełniająca:</u> [8] L. Sobczyk, A. Kiswa, K. Gartner, A. Koll, Eksperymentalna chemia fizyczna, PWN, Warszawa 1982. [9] A. Bielański, K. Gumiński, B. Kamiński, K. Pigoń, L. Sobczyk, Chemia fizyczna, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1980. [10] S. Bursa, Chemia fizyczna, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1976.
Witryna www przedmiotu	Część kwantowa: <a href="http://lulinski.ch.pw.edu.pl">lulinski.ch.pw.edu.pl</a> ; zakładka files.
<b>D. Nakład pracy studenta</b>	
Liczba punktów ECTS	5

Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się	130 h, w tym: 60 h - godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim wynikające z planu studiów, 10 h - godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim w ramach konsultacji, egzaminów, sprawdzianów itp., 30 h - godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do zajęć oraz opracowania sprawozdań, projektów, prezentacji, raportów, prac domowych, 30 h - godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do egzaminu, sprawdzianu, zaliczenia
Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	2 pkt. ECTS (60 h - godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim wynikające z planu studiów)
Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	2 pkt. ECTS (60 h; w tym: przygotowanie do laboratorium i obecność na zajęciach 45 h, opracowanie wyników 15 h)
<b>E. Informacje dodatkowe</b>	
Uwagi	O ile nie powoduje to zmian w zakresie powiązań danego przedmiotu z efektami uczenia się określonymi dla programu studiów w treściach kształcenia mogą być wprowadzane na bieżąco zmiany związane z uwzględnieniem najnowszych osiągnięć naukowych.
Data aktualizacji	22.02.2021