

<b>Opis przedmiotu</b>			
Kod przedmiotu	1020-TCWYK-ISP-5006		
Nazwa przedmiotu	Termodynamika molekularna		
	Molecular Thermodynamics		
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		
Koordynator przedmiotu	dr hab. inż. Tadeusz Hofman, prof. ucz.		
<b>B. Ogólna charakterystyka przedmiotu</b>			
Przynależność do grupy/bloku przedmiotów	Przedmioty kierunkowe		
Poziom przedmiotu	Poziom średniozaawansowany		
Status przedmiotu	Przedmiot obieralny		
Język prowadzenia zajęć	polski		
Usytuowanie przedmiotu w planie zajęć - semestr nominalny	5		
Usytuowanie realizacji przedmiotu w roku akademickim	semestr zimowy		
Wymagania wstępne - formalne	brak		
Limit liczby studentów	30		
<b>C. Efekty uczenia się i sposób prowadzenia zajęć</b>			
Cel przedmiotu	Poszerzenie i ugruntowanie wiedzy z podstaw termodynamiki fenomenologicznej poprzez odwołanie się do metod termodynamiki statystycznej. Wyjaśnienie podstaw termodynamiki statystycznej. Wykazanie związku praw termodynamiki z oddziaływaniami cząsteczkowymi. Zdobywanie umiejętności praktycznego opisu i przewidywania właściwości termodynamicznych rzeczywistych mieszanin cieczy i gazów. Część praktyczna posłuży do nauki samodzielnego poszukiwania danych termodynamicznych, weryfikacji ich dokładności oraz wykorzystania do obliczeń równowag fazowych i efektów mieszania.		
	Deeper understanding of the principles of phenomenological thermodynamics using the methods of statistical thermodynamics. Explanation of basic ideas and methodologies of statistical thermodynamics. The connection between the laws of thermodynamics and molecular interactions. The students are expected to acquire the skills of practical description and prediction of thermodynamic properties of real mixtures of liquids and gases. The final part will teach how to search for thermodynamic data, verify their accuracy and use them to calculate phase equilibria and mixing functions.		
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 efekty uczenia się w zakresie wiedzy</b>			
W01	Znajomość podstaw termodynamiki statystycznej	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W03
	The principles of statistical thermodynamics		
W02	Wiedza na temat modelowego opisu właściwości termodynamicznych mieszanin	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W03
	Knowledge of the basic models applied for the thermodynamic properties		

<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności</i>					
U01	Stosowanie opisu modelowego do przewidywania właściwości fizykochemicznych mieszanin	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o		K_U13	
	Using a model description to predict the physicochemical properties of mixtures				
U02	Umiejętność krytycznej analizy danych termodynamicznych	I.P6S_UW.o I.P6S_UK III.P6S_UW.o		K_U01 K_U10 K_U11	
	Critical analysis of thermodynamic data				
<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych</i>					
KS01	Umiejętność właściwego formułowania problemów z zakresu termodynamicznego opisu mieszanin	I.P6S_KK		K_K02	
	The ability to define basic problems concerning the thermodynamic description of mixtures				
Forma zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt/laboratorium komputerowe	Seminarium
W planie tygodniowym	2	1			
W całym semestrze	26	4			
Treści kształcenia – oddzielnie dla każdej z formy zajęć dydaktycznych	<i>Wykład:</i>				
	1. Elementy termodynamiki statystycznej				10 h
	1.1. Podstawowe pojęcia				
	1.2. Zasada równych prawdopodobieństw				
1.3. Hipoteza ergodyczna					
1.4. Zasada wzrostu entropii i jej konsekwencje					
1.5. Zespoły statystyczne (mikrokanoniczny, kanoniczny, wielki zespół kanoniczny)					
1.6. Funkcja podziału					
1.7. Statystyki kwantowe					
1.8. Funkcja podziału dla gazu doskonałego					
1.9. Przybliżenie pseudoklasyczne i konfiguracyjna funkcja podziału					
1.10. Oddziaływania międzycząsteczkowe					
2. Symulacje komputerowe - dynamika molekularna i metody Monte Carlo				2 h	
3. Modele cieczy i gazów				10 h	
3.1. Modele oparte na uogólnionej funkcji podziału van der Waalsa					
3.2. Modele siatkowe					
3.3. Chemiczne modele asocjacji					
3.5. Metody udziałów grupowych i ich zastosowania do przewidywania właściwości termodynamicznych					
4. Podstawy ilościowego opisu właściwości termodynamicznych				4 h	
4.1. Zastosowanie metod obliczeniowych do opisu układów – przewidywanie i korelacja					
4.2. Wybrane właściwości termodynamiczne dla czystych substancji i mieszanin oraz praktyczne aspekty ich opisu					
<i>Ćwiczenia:</i>				4 h	
Analiza wybranych danych literaturowych – ocena błędów eksperymentalnych, dopasowanie parametrów modelu, przewidywanie i ocena dokładności metody.					
<i>Lectures:</i>					
1. Principles of statistical thermodynamics				10 h	
1.1. Basic concepts					
1.2. The principle of equal probabilities					
1.3. Ergodic hypothesis					
1.4. The principle of entropy increases maximum and its consequences					
1.5. Statistical ensembles (microcanonical, canonical, grand canonical)					
1.6. Partition function					
1.7. Quantum statistics					
1.8. The partition function for an ideal gas					
1.9. Pseudo-classical approximation and configurational partition function					
1.10. Intermolecular interactions					
2. Computer simulations - molecular dynamics and Monte Carlo methods				2 h	
3. Models of liquids and gases				10 h	
3.1. The generalized van der Waals partition function					
3.2. Lattice theories					
3.3. Chemical models of association					
3.5. Group contribution methods and their applications to predict thermodynamic properties					
4. Basics of quantitative description of thermodynamic properties				4 h	

	<p>4.1. Application of computational methods for the system description - prediction and correlation</p> <p>4.2. Selected thermodynamic properties for pure substances and mixtures and practical aspects of their description</p> <p><i>Exercises:</i> Analysis of selected literature data - evaluation of experimental errors, adjustment of model parameters, prediction of properties and evaluation of the method's accuracy.</p>
Metody kształcenia	<p><i>Wykład:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Wykład stacjonarny</li> <li>Obszerne streszczenia i podsumowania, przesyłane studentom po wykładzie</li> </ol> <p><i>Ćwiczenia:</i> Wspólne rozwiązywanie problemów</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
W02	Kolokwium pisemne
Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności	
U01	Kolokwium pisemne
U02	Ocena pracy domowej
Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych	
KS01	Kolokwium pisemne, ocena pracy semestralnej
Metody oceny	<p><i>Wykład:</i> Ocenę pozytywną uzyskuje się zdobywając minimum 50 % punktów na kolokwium zaliczeniowym. Na tej podstawie, maksymalną można uzyskać maksymalną ocenę za przedmiot 4 (dobry). Warunkiem koniecznym wyższej oceny jest zaliczenie pracy semestralnej. Praca polega na samodzielnej analizie wybranego zestawu danych literaturowych i wyciągnięciu wniosków na temat dokładności danych i właściwości badanego układu. Organizuje się dwa terminy kolokwium zaliczeniowych, z których oba mogą być wykorzystane przez studentów.</p>
Egzamin	Nie
Literatura	<ol style="list-style-type: none"> <li>T. Hofman, Termodynamika molekularna, OWPW, 2002</li> <li>H. Buchowski, Elementy termodynamiki statystycznej, WNT, Warszawa 1998.</li> <li>J.M. Prausnitz, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1969.</li> <li>N.A. Smirnowa, Metody termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, PWN, Warszawa 1980.</li> <li>K. Zalewski, Wykłady z mechaniki i termodynamiki statystycznej dla chemików, PWN, Warszawa 1982.</li> </ol>
Witryna www przedmiotu	<a href="http://hof.ch.pw.edu.pl/termo_mole.htm">http://hof.ch.pw.edu.pl/termo_mole.htm</a>
<b>D. Nakład pracy studenta</b>	
Liczba punktów ECTS	2
Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się	50 h, w tym godziny kontaktowe 30 h; zapoznanie z literaturą – 10 h, przygotowanie do kolokwium – 10 h, przygotowanie pracy semestralnej – 10 h
Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	1 pkt. ECTS (obecność na wykładach i kolokwium)
Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	Brak
<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