

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Insights into reaction mechanisms and kinetics via quantum chemistry methods (laboratory classes), PG_00119776						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii Teoretycznej -> Pracownia Chemii Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Iwona Anusiewicz				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	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		15.0	50
Cel przedmiotu	Zdobycie wiedzy w zakresie podstawowych pojęć związanych z mechanizmami reakcji chemicznych. Nabycie umiejętności oszacowywania barier aktywacji i barier termodynamicznych reakcji chemicznych. Nabycie umiejętności używania metod teoretycznych do przewidywania stałych szybkości reakcji chemicznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student rozwija umiejętność trafnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania. Uczy się zasad bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy. Rozwija umiejętność pracy w grupie.	[SK2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student wie jak dokonać badania mechanizmu danej reakcji chemicznej.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student nabywa umiejętność oszacowywania wysokości barier aktywacyjnych i barier termodynamicznych	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Student wie jak dobrać odpowiednie metody teoretyczne do badanej reakcji chemicznej.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_U05] Prezentuje wyniki badań w postaci samodzielnie zredagowanej pracy pisemnej, zawierającej opis i uzasadnienie celu pracy, przyjętą metodologię, wyniki oraz ich znaczenie na tle innych podobnych badań.	Student nabywa umiejętność obliczania stałej szybkości reakcji i przewiduje ogólny przebieg reakcji	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student definiuje i opisuje podstawowe pojęcia związane z mechanizmami reakcji chemicznych, rozumie wpływ barier aktywacyjnych na stałą szybkości reakcji	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student nabywa umiejętność lokalizacji stanów przejściowych na drodze reakcji,	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport	
Treści przedmiotu	<p>Kurs obejmuje nabycie wiedzy i umiejętności z zakresu podstawowych pojęć związanych z mechanizmami reakcji chemicznych, w tym wzorów niezbędnych do obliczenia stałej szybkości reakcji. Studenci dowiedzą się, jak uzyskać ogólny obraz mechanizmu reakcji, rozróżnić mechanizmy skoordynowane i wieloetapowe, znaleźć początkowe kompleksy substratów, zlokalizować stany przejściowe (punkty siodłowe) i produkty pośrednie, oszacować wysokość barier kinetycznych (aktywacji), wyznaczyć wysokości barier termodynamicznych i dokonywać obliczeń stałych szybkości reakcji. Umiejętności te będą nabywane poprzez studiowanie rzeczywistych przykładów różnych mechanizmów reakcji z wykorzystaniem narzędzi obliczeniowej chemii kwantowej.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	podstawowa wiedza z zakresu chemii		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Kryteria oceny zgodne z Regulaminem Studiów Uniwersytetu Gdańskiego Zajęcia laboratoryjne: oceny na podstawie jakości zaliczonych rozwiązań ćwiczenia	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <p>Energetic Principles of Chemical Reactions, J. Simons, Jones and Bartlett Publishers, Inc., 1983. An Introduction to Theoretical Chemistry, J. Simons, Cambridge University Press, 2003</p>		

	Uzupełniająca lista lektur	Geometrical Derivative of Energy Surfaces and Molecular Properties, P. Jorgensen, J. Simons, D. Reidel Publishing Company, 1985
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Obliczyć stałą szybkości reakcji przemiany $\text{CH}_3\text{CN} \rightarrow \text{CH}_3\text{NC}$ w fazie gazowej i w środowisku wodnym.	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.