



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Fizykochemiczne podstawy procesów chemicznych i biochemicznych [S1Bioinf1>FIZCHEM]

Przedmiot

Kierunek studiów
Bioinformatyka

Rok/Semestr
2/4

Studia w zakresie (specjalność)
–

Profil studiów
ogólnoakademicki

Poziom studiów
pierwszego stopnia

Język oferowanego przedmiotu
polski

Forma studiów
stacjonarne

Wymagalność
obieralny

Liczba godzin

Wykład
30

Laboratorium
15

Inne
0

Ćwiczenia
15

Projekty/seminaria
0

Liczba punktów ECTS

4,00

Koordynatorzy

dr hab. inż. Agnieszka Świdorska-Mocek
agnieszka.swiderska-mocek@put.poznan.pl

Wykładowcy

Wymagania wstępne

Ma wiedzę z zakresu chemii ogólnej (pisanie reakcji chemicznych, przeliczanie stężeń, znajomość szkła laboratoryjnego i podstawowych urządzeń laboratoryjnych). Ma wiedzę z zakresu matematyki i fizyki umożliwiającą wprowadzenie zagadnień z chemii fizycznej (podstawowe prawa fizyki, aparat różniczkowy). Potrafi przygotować roztwory o danych stężeniach. Posiadanie świadomości dalszego poszerzania swoich kompetencji.

Cel przedmiotu

Zapoznanie studentów z zagadnieniami z fizykochemicznymi aspektami procesów chemicznych oraz biochemicznych na poziomie akademickim w zakresie: termodynamika i kinetyka reakcji.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:

podstawowe zjawiska i procesy biologiczne, a ich interpretację opiera na podstawach empirycznych, wykorzystując metody matematyczne, w tym statystyczne oraz uczenia maszynowego, K_W01 zagadnienia z zakresu fizyki przydatne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań bioinformatycznych, obejmujące wybrane zagadnienia termodynamiki i fizyczne podstawy procesów

biologicznych, K_W03

zagadnienia z zakresu chemii przydatne do formułowania i rozwiązywania prostych zadań bioinformatycznych, obejmujące podstawowe pojęcia i prawa chemii, chemię organiczną i biochemię, K_W04

podstawy teoretyczne modelowania procesów biologicznych K_W17

Umiejętności:

pozyskiwać informacje z literatury, baz danych oraz innych właściwie dobranych źródeł, także w języku angielskim, K_U01

integrować i interpretować uzyskane informacje, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać swoje opinie K_U02

Kompetencje społeczne:

uczenia się przez całe życie i podnoszenia swoich kompetencji, K_K01

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Wykład: Wiedza nabyta w ramach wykładu jest weryfikowana podczas zaliczenia pisemnego. Zaliczenie składa się z 2 pytań otwartych za taką samą liczbę punktów i 15 pytań testowych. Próg zaliczeniowy: 53% punktów.

Ćwiczenia laboratoryjne: ocena na podstawie ilości punktów otrzymanych za wykonanie poszczególnych ćwiczeń. Próg zaliczeniowy: 53%

Ćwiczenia rachunkowe: ocena na podstawie zdobytych punktów za aktywność w trakcie zajęć, napisanie kolokwium. Próg zaliczeniowy: 60%

Jeżeli zajęcia będą odbywać się w trybie zdalnym, formy zaliczenia przedmiotu pozostają bez zmian i będą przeprowadzane z wykorzystaniem narzędzi udostępnionych przez Politechnikę Poznańską

Treści programowe

Przedmiot obejmuje zagadnienia związane z fizykochemicznymi aspektami procesów chemicznych oraz biochemicznych w zakresie termodynamiki i kinetyki reakcji. Dotyczy termodynamicznego opisu reakcji polegającego na zdefiniowaniu funkcji stanu oraz określeniu kierunku przebiegu reakcji chemicznych i biochemicznych z wyznaczeniem ich efektów energetycznych. Analiza wpływu temperatury, ciśnienia i katalizatora na szybkość przebiegu tych reakcji z uwzględnieniem mechanizmu procesów (reakcji proste i złożone).

Tematyka zajęć

WYKŁADY

1. Podstawy termodynamiki - pierwsza zasada termodynamiki.

Energia wewnętrzna. Bilans energetyczny reakcji. Różnica energii zawartej w produktach i substratach wymieniana z otoczeniem. I zasada termodynamiki). Ciepło i praca jako sposoby wymiany energii. Średnia energia cieplna cząsteczek. Rozkład Maxwell'a-Boltzman'a. Temperatura. Skala termodynamiczna temperatury.

2. Druga zasada termodynamiki

Definicja entropii. Odwracalność i nieodwracalność procesu (reakcji) w sensie termodynamicznym. Całkowita zmiana entropii jako suma zmian entropii układu i otoczenia. Zerowa (trzecia) zasada termodynamiki.

3. Potencjały termodynamiczne

Procesy samorzutnie i wymuszone. Koncepcja funkcji stanu, jej wyrażenie matematyczne. Proces izobaryczny, izochoryczny i adiabatyczny. Pojęcie entalpii, Energii swobodnej, entalpii swobodnej. Ciepło procesu izobarycznego i izochorycznego. Kiedy używać której funkcji ($p = \text{const}$ lub $v = \text{const}$).

4. Termochemia

Efekty energetyczne reakcji chemicznych. Pojemność cieplna substancji. Pomiar ciepła reakcji – kalorymetria. Ciepło w stałej objętości Q_v , ciepło w stałym ciśnieniu Q_p . Zależność ciepła procesu izobarycznego i izochorycznego od temperatury. Zależność pojemności cieplnej od temperatury. Różnica

pomiędzy C_p i C_v oraz Q_p i Q_v . Równania termochemiczne. Ciepło procesu i ciepło substancji.

5. Standaryzacja efektów cieplnych.

Arbitralne warunki standardowe ($p = 1 \text{ atm}$, $T = 298 \text{ K}$). Standardowe ciepła substancji – reguły wyznaczania. Entropia standardowa. Wyznaczanie efektów cieplnych i entropowych procesów chemicznych.

6. Zależności pomiędzy funkcjami termodynamicznymi.

Zależność energii swobodnej od temperatury oraz objętości. Zależność entalpii swobodnej od temperatury oraz ciśnienia. Zależność entalpii od ciśnienia. Zależność ciśnienia od objętości i temperatury. Zależność energii wewnętrznej od objętości.

7. Równowaga reakcji chemicznej

Definicja równowagi reakcji. Stała równowagi reakcji. Związek stałej równowagi z energią i entalpią swobodną: izoterma van't Hoff'a. Zależność położenia równowagi od temperatury, izobara i izochora van't Hoff'a. Zależność położenia równowagi od ciśnienia. Przykłady. Obliczanie położenia równowagi i wydajności reakcji z danych termodynamicznych.

8. Kinetyka chemiczna - Reakcje proste.

Opis szybkości reakcji chemicznych, mechanizmu oraz wpływu różnych czynników na szybkość reakcji. Częstotliwość. Rząd reakcji. Równania kinetyczne. Okres połowicznego przereagowania. Zależność szybkości reakcji od stężenia.

9. Wpływ temperatury

Zależność szybkości reakcji od temperatury – energia aktywacji. Teoria zderzeń aktywnych – równanie Arrheniusa. Teoria kompleksu aktywnego – równanie Eyringa

10. Kinetyka - reakcje złożone.

Reakcje odwracalne. Reakcje równoległe. Reakcje następcze. Reakcje łańcuchowe. Reakcje wybuchowe. Przybliżenie stanu stacjonarnego. Reakcje oscylacyjne. Kataliza. Definicja katalizatora. Mechanizm działania katalizatora. Rodzaje katalizy. Kataliza heterogeniczna. Kataliza homogeniczna. Kataliza enzymatyczna. Przykłady.

ĆWICZENIA RACHUNKOWE

Na ćwiczeniach rachunkowych przewidziano obliczenia dotyczące efektów energetycznych reakcji chemicznych, wartości ciepła procesów, wyprowadzenia równań kinetycznych reakcji oraz obliczenia związane z wyznaczaniem stężeń reagentów z równań kinetycznych, a także obliczenia związane z określaniem wpływu temperatury na szybkość reakcji chemicznych.

ĆWICZENIA LABORATORYJNE

w kursie przewidziano przeprowadzenie 4 ćwiczeń laboratoryjnych -eksperymentów fizykochemicznych związanych z efektami energetycznymi i kinetycznymi reakcji chemicznych. Student planuje, przeprowadza eksperyment, analizuje wyniki i opracowuje wnioski z przeprowadzonego eksperymentu. Zagadnienia:

Pomiar ciepła reakcji. Prawa termochemiczne. Równania termodynamiczne. Ciepło reakcji przy stałym ciśnieniu lub przy stałej objętości. Molowe entalpie tworzenia, spalania, rozpuszczania, rozcieńczania i inne. Kalorymetria.

Szybkość reakcji, stała szybkości reakcji. Rzędowość i częstotliwość reakcji. Teoria zderzeń aktywnych, teoria stanu przejściowego. Zależność stałej szybkości reakcji od temperatury. Równanie Eyringa. Równanie Arrheniusa. Energia aktywacji procesu. Kinetyka reakcji 0, I, II oraz III rzędu.

Metody dydaktyczne

Wykład - prezentacja

Ćwiczenia rachunkowe z dyskusją. Metoda dedukcyjna. Ćwiczenia polegają na rozwiązywaniu zadań cząstkowych i rozwiązywaniu problemów szczegółowych.

Laboratorium - metoda praktyczna - ćwiczenia laboratoryjne. Planowanie, wykonanie i analiza rezultatów eksperymentu fizykochemicznego.

Literatura

Podstawowa

1. K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia Fizyczna, PWN Warszawa 2013

2. P. Atkins, Chemia Fizyczna, PWN Warszawa 2019

Uzupełniająca

1. P. Atkins, Podstawy Chemii Fizycznej, PWN, Warszawa 1999

2. L. Sobczyk, A. Kiszka, Chemia fizyczna dla przyrodników PWN Warszawa 1977

3. H. Buchnowski, W. Ufnalski Wykłady z chemii fizycznej WNT Warszawa 1998

4. P.W. Atkins, C.A Trapp, M.P.Cady, C.Giunta Chemia fizyczna. Zbiór zadań z rozwiązaniami.
5. J. Demichowicz-Pigoniowa Obliczenia fizykochemiczne, Wydawnictwo Politechniki Wrocławskiej Wrocław 1997.
6. W. Ufnalski. Obliczenia fizykochemiczne. Wydawnictwo Politechniki Warszawskiej 1998

Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	100	4,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	60	2,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu)	40	1,50