



## KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Termodynamiczne i kinetyczne podstawy reakcji chemicznych i biochemicznych [S1Bioinf1>TERDYN]

### 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. Maciej Galiński prof. PP  
maciej.galinski@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 termodynamiki i kinetyki chemicznej na poziomie akademickim w zakresie: - pierwsza i druga zasada termodynamiki, potencjały termodynamiczne, termochemia, efekty energetyczne reakcji chemicznych oraz matematyczne relacje funkcji termodynamicznych. Zapoznanie się studentów ze sposobami opisu szybkości reakcji chemicznych i biochemicznych, podstawowych równań kinetycznych reakcji prostych i złożonych, określania mechanizmów reakcji oraz wpływu czynników zewnętrznych na kinetykę reakcji. Zapoznanie się studentów z zagadnieniami katalizy chemicznej, kataliza homo i heterogeniczna oraz katalizy enzymatycznej

### 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: prezentacja multimedialna - zaliczenie

Laboratorium: Ocena na podstawie ilości punktów otrzymanych za wykonanie i opracowanie poszczególnych ćwiczeń. 56%

Ćwiczenia rachunkowe: zaliczenie pisemne, powyżej 75%

### Treści programowe

W ramach kursu zostaną omówione podstawy fizykochemicznego opisu procesów chemicznych: opis efektów energetycznych, równowaga chemiczna oraz opis kinetyki reakcji chemicznych i biochemicznych w tym katalizowanych.

Podstawowe równania termodynamiki. Funkcje termodynamiczne. Pojemność cieplna. Równowaga reakcji chemicznych. Energetyka reakcji chemicznych. Wpływ temperatury i ciśnienia na stan równowagi reakcji. Wpływ temperatury i ciśnienia na ciepło reakcji chemicznych. Równania kinetyczne reakcji chemicznych. Reakcje proste. Reakcje złożone. Reakcje katalityczne. Reakcje enzymatyczne. Reakcje wybuchowe. Molekularna interpretacja reakcji chemicznych, pojęcie rzędu i cząsteczkowości reakcji chemicznych. Zależności temperaturowe reakcji chemicznych. Energia aktywacji. Równanie empiryczne Arrheniusa. Teoria zderzeń aktywnych. Teoria stanu stacjonarnego.

#### WYKŁADY

##### 1. Pierwsza zasada termodynamiki - zasada zachowania energii

Koncepcja energii wewnętrznej. Bilans energetyczny reakcji (procesu) – bilans energii wewnętrznej. Różnica energii zawartej w produktach i substratach wymieniana z otoczeniem. Zasada zachowania energii, jej postać matematyczna (pierwsza zasada termodynamiki). Definicja termodynamiczna pracy, jej rodzaje. Praca: elektryczna, zmiany powierzchni, objętościowa. Jak jest magazynowana energia wewnętrzna. Energia cieplna. Średnia energia cieplna cząsteczek. Rozkład Maxwell'a-Boltzman'a. Temperatura, różne jej skale. Skala termodynamiczna temperatury.

2. Druga zasada termodynamiki – Koncepcja entropii. Całkowita entropia może rosnąć, ale nie może się zmniejszać. Odwracalność procesu (reakcji) w sensie termodynamicznym. Całkowita zmiana entropii jako suma zmian entropii układu i otoczenia. Zerowa (trzecia) zasada termodynamiki.

##### 3. Siła napędowa procesów – potencjały termodynamiczne

Praca i ciepło zależą od sposobu prowadzenia procesu. Dlaczego nie używamy w termodynamice wielkości do których jesteśmy przyzwyczajeni (ciepło, praca). Koncepcja funkcji stanu, jej wyrażenie matematyczne. Proces izobaryczny, izochoryczny i adiabatyczny. Pojęcie entalpii. Ciepło procesu izobarycznego i izochorycznego. Koncepcja energii swobodnej. Entalpia swobodna. Kiedy używać której funkcji ( $p = \text{const}$  lub  $v = \text{const}$ ).

##### 4. Termochemia

Pojemność cieplna. Pomiar ciepła – kalorymetr. 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 funkcji termodynamicznych

Ciepła standardowe substancji – reguły wyznaczania. Arbitralne warunki standardowe ( $p = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 298 \text{ K}$ ). Standaryzujemy ciepła substancji, a nie procesów z ich udziałem – to redukuje ilość koniecznych danych o wiele rzędów. Entropia standardowa - wyznaczanie. Kalorymetryczne mierzenie entropii substancji.

#### 6. Matematyczne relacje termodynamiczne

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

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 - Reakcje proste.

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

9. 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.

11. Reakcje oscylacyjne. Kataliza. Definicja katalizatora. Mechanizm działania katalizatora. Rodzaje katalizy. Kataliza heterogeniczna. Kataliza homogeniczna. Kataliza enzymatyczna.

#### ĆWICZENIA RACHUNKOWE

W ramach ćwiczeń rachunkowych przewidziano obliczenia efektów energetycznych reakcji chemicznych, oraz 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 kilku eksperymentów fizykochemicznych skoncentrowanych na efektach energetycznych i kinetycznych reakcji chemicznych. Student planuje, przeprowadza eksperyment, analizuje wyniki i opracowuje wnioski z przeprowadzonego eksperymentu.

#### Zagadnienia:

Ciepło reakcji i jej pomiar. Prawa termodynamiczne. Prawa termochemiczne. 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.

### Tematyka zajęć

W ramach kursu zostaną omówione podstawy fizykochemicznego opisu procesów chemicznych: opis efektów energetycznych, równowaga chemiczna oraz opis kinetyki reakcji chemicznych i biochemicznych w tym katalizowanych.

Podstawowe równania termodynamiki. Funkcje termodynamiczne. Pojemność cieplna. Równowaga reakcji chemicznych. Energetyka reakcji chemicznych. Wpływ temperatury i ciśnienia na stan równowagi reakcji. Wpływ temperatury i ciśnienia na ciepło reakcji chemicznych. Równania kinetyczne reakcji chemicznych. Reakcje proste. Reakcje złożone. Reakcje katalityczne. Reakcje enzymatyczne. Reakcje wybuchowe. Molekularna interpretacja reakcji chemicznych, pojęcie rzędu i częstotliwości reakcji chemicznych. Zależności temperaturowe reakcji chemicznych. Energia aktywacji. Równanie empiryczne Arrheniusa. Teoria zderzeń aktywnych. Teoria stanu stacjonarnego.

#### WYKŁADY

##### 1. Pierwsza zasada termodynamiki - zasada zachowania energii

Koncepcja energii wewnętrznej. Bilans energetyczny reakcji (procesu) – bilans energii wewnętrznej. Różnica energii zawartej w produktach i substratach wymieniana z otoczeniem. Zasada zachowania energii, jej postać matematyczna (pierwsza zasada termodynamiki). Definicja termodynamiczna pracy, jej rodzaje. Praca: elektryczna, zmiany powierzchni, objętościowa. Jak jest magazynowana energia

wewnętrzna. Energia cieplna. Średnia energia cieplna cząsteczek. Rozkład Maxwell'a-Boltzman'a. Temperatura, różne jej skale. Skala termodynamiczna temperatury.

2. Druga zasada termodynamiki – Koncepcja entropii. Całkowita entropia może rosnać, ale nie może się zmniejszać. Odwracalność procesu (reakcji) w sensie termodynamicznym. Całkowita zmiana entropii jako suma zmian entropii układu i otoczenia. Zerowa (trzecia) zasada termodynamiki.

3. Siła napędowa procesów – potencjały termodynamiczne

Praca i ciepło zależą od sposobu prowadzenia procesu. Dlaczego nie używamy w termodynamice wielkości do których jesteśmy przyzwyczajeni (ciepło, praca). Koncepcja funkcji stanu, jej wyrażenie matematyczne. Proces izobaryczny, izochoryczny i adiabatyczny. Pojęcie entalpii. Ciepło procesu izobarycznego i izochorycznego. Koncepcja energii swobodnej. Entalpia swobodna. Kiedy używać której funkcji ( $p = \text{const}$  lub  $v = \text{const}$ ).

4. Termochemia

Pojemność cieplna. Pomiar ciepła – kalorymetr. 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 funkcji termodynamicznych

Ciepła standardowe substancji – reguły wyznaczania. Arbitralne warunki standardowe ( $p = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 298 \text{ K}$ ). Standaryzujemy ciepła substancji, a nie procesów z ich udziałem – to redukuje ilość koniecznych danych o wiele rzędów. Entropia standardowa - wyznaczanie. Kalorymetryczne mierzenie entropii substancji.

6. Matematyczne relacje termodynamiczne

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

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 - Reakcje proste.

Opis szybkości reakcji chemicznych, mechanizmu oraz wpływu różnych czynników na szybkość reakcji. Cząsteczkowość. Rząd reakcji. Równania kinetyczne. Okres połowicznego przereagowania.

9. 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.

11. Reakcje oscylacyjne. Kataliza. Definicja katalizatora. Mechanizm działania katalizatora. Rodzaje katalizy. Kataliza heterogeniczna. Kataliza homogeniczna. Kataliza enzymatyczna.

#### ĆWICZENIA RACHUNKOWE

W ramach ćwiczeń rachunkowych przewidziano obliczenia efektów energetycznych reakcji chemicznych, oraz 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 kilku eksperymentów fizykochemicznych skoncentrowanych na efektach energetycznych i kinetycznych reakcji chemicznych. Student planuje, przeprowadza eksperyment, analizuje wyniki i opracowuje wnioski z przeprowadzonego eksperymentu.

Zagadnienia:

Ciepło reakcji i jej pomiar. Prawa termodynamiczne. Prawa termochemiczne. 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 cząsteczkowość 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