

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 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
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_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Student nabywa umiejętność lokalizacji stanów przejściowych na drodze 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_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_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_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_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student wie jak dokonać badania mechanizmu danej reakcji chemicznej.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[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
Treści przedmiotu	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.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	podstawowa wiedza z zakresu chemii		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny 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	Podstawowa lista lektur	Energetic Principles of Chemical Reactions, J. Simons, Jones and Bartlett Publishers, Inc., 1983. An Introduction to Theoretical Chemistry, J. Simons, Cambridge University Press, 2003	

	Uzupełniająca lista lektur	Geometrical Derivative of Energy Surfaces and Molecular Properties, P. Jorgensen, J. Simons, D. Reidel Publishing Company, 1985
	Adresy eZasobów	
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.