

Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Wykład dyplomowy - Fizykochemia molekuł			13.3.0500
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Fizycznej.			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia
		specjalnościowy	żywności, chemia kosmetyków
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Karol Krzywiński; dr Artur Sikorski; prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr inż. Beata Zadykowicz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			2
Wykład			zajęcia 30 godz.
Sposób realizacji zajęć			konsultacje 5 godz.
zajęcia w sali dydaktycznej			praca własna studenta 15 godz.
Liczba godzin			RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 letni			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
obowiązkowy	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
Wykład z prezentacją multimedialną	Sposób zaliczenia		
	Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
	kolokwium		
	Podstawowe kryteria oceny		
	• zaliczenie składa się z 20 pytań testowych jednokrotnego wyboru, obejmujących materiał omawiany na wykładzie wyszczególniony w treściach nauczania (każdy prowadzący przygotowuje po 4 pytania);		
	• skala ocen zgodna z odpowiednim rozporządzeniem Rektora UG (według sumarycznej punktacji: 51% - 3,0 (dst) 91% - 5,0 (bdb); pośrednie oceny zgodne z interpolacją liniową).		
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

W teście zaliczeniowym student wykazuje się umiejętnością rozwiązywania problemów fizykochemicznych związanych z treścią wykładów (K_W03); udziela poprawnych odpowiedzi z zakresu podstaw krystalografii (K_W02); podstaw spektroskopii (K_W03); podstaw chemii teoretycznej (K_W02); podstaw syntezy heterocyklicznej (K_W02).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Rozwiązuje proste zadania problemowe wymagające zastosowania poznanych praw fizykochemicznych (K_U01);

Potrafi przewidzieć zachowanie związków na podstawie danych fizykochemicznych (K_U01);

Rozwiązuje zadania testowe wymagające obcowania z literaturą źródłową (K_U08).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Aktywnie uczestniczy w dyskusji podczas zajęć i przy omawianiu wyników egzaminu i podejmuje się samodzielnego rozwiązywania zadań problemowych w czasie trwania semestru, motywowany chęcią poszerzania wiedzy (K_K01);

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

Zaliczony przedmiot chemia ogólna oraz chemia fizyczna.

B. Wymagania wstępne

brak

Cele kształcenia

1. Zapoznanie studentów z budową kryształów, podstawowymi prawami krystalograficznymi, oraz ze sposobem wyznaczania struktury przestrzennej monokryształów metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej.
2. Zaznajomienie studentów z zasadami ilościowego modelowania zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami fizykochemicznymi (ang. Quantitative Structure-Property Relationships, QSAR).
3. Zapoznanie teoretyczne ze zjawiskami luminescencji związków organicznych (fluorescencja, chemiluminescencja, bioluminescencja) oraz podstawami chemii i spektroskopii heterocyklicznych związków azotowych ze szczególnym uwzględnieniem akrydyn.
4. Wprowadzenie do metod obliczeniowych stosowanych do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym.
5. Zapoznanie z fizykochemicznymi metodami badań molekuł biologicznych: znakowanie fluorescencyjne, technika PCR (ang. Polymerase Chain Reaction) i RT-PCR (ang. Real Time-PCR).

Treści programowe

1. Definicja kryształu; Komórka elementarna; Układy krystalograficzne; Sieć krystaliczna; Sieć przestrzenna; Klasyfikacja ciał krystalicznych oparta na symetrii; Symetria w budowie zewnętrznej i wewnętrznej kryształów; Podstawy rentgenowskiej analizy strukturalnej monokryształów; Źródła i charakterystyka promieniowania rentgenowskiego; Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego na sieci krystalicznej; Rozwiązywanie i udokładnianie struktury krystalicznej.
2. Podstawowe założenia, zastosowania i ograniczenia ilościowych metod modelowania; Zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami fizykochemicznymi (ang. Quantitative Structure-Property Relationships, QSPR); Wybrane deskryptory struktury chemicznej; Algorytm kalibracji i walidacji modelu QSPR zgodnie z zaleceniami OECD.
3. Podstawy fizykochemiczne procesu fluorescencji, chemiluminescencji i bioluminescencji; Pomiary emisji promieniowania z roztworów; Analiza widm luminescencji; Przykłady zastosowań chemiluminescencji i bioluminescencji w analityce medycznej; Najważniejsze reakcje chemiczne pirydyn i akrydyn, przykłady syntez złożonych; Analiza fizykochemiczna związków heterocyklicznych – powstawanie i pomiary widm magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR), widm masowych (MS) oraz widm oscylacyjnych (IR).
4. Współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezjańskie; Wprowadzenie do metod ab initio i półempirycznych oraz teorii funkcjonałów gęstości elektronowej; Zastosowania chemii kwantowej do optymalizacji geometrii, określania właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek; Wyznaczanie efektów solwatacyjnych; Termodynamika i kinetyka reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej; Przewidywanie charakterystyk widmowych metodami mechaniki kwantowej.
5. Izolacja kwasów nukleinowych; Reakcja łańcuchowa polimerazy (PCR): definicje, odmiany, modyfikacje, zastosowania; Optymalizacja warunków reakcji PCR. Zastosowanie barwników fluorescencyjnych w technice RT-PCR.

Wykaz literatury**Podstawowa:**

1. Materiały w wersji elektronicznej przekazane przez prowadzących.
2. Bojarski Z., Gigla M., Stróż K., Surowiec M.: Krystalografia, PWN, 2008.
3. Trzaska-Durski Z., Trzaska Durska H.: Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenografii, Oficyna Wydawnicza. Politechniki Warszawskiej, 2003.

Uzupełniająca:

1. Atkins, P.W., Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001.
2. Penkala, T.: Zarys Krystalografii, PWN, 1983.
3. Luger, P.: Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN, 1989.
4. Wells, A. F.: Strukturalna chemia nieorganiczna, WNT, 1993.
5. Suppan, P.: Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997.
6. Młochowski, J.: Chemia związków heterocyklicznych, PWN, Warszawa 1994.
7. Frisch, E. Frisch M.J.: Gaussian 98 User's Reference, Manual Version: 6.1, January, 1999.
8. Buckingham, M.L., Flaws, L.: Molecular diagnostics: Fundamentals, Methods and Clinical Applications. 2007.

**Efekty kształcenia
(obszarowe i kierunkowe)**

K_W02: opisuje właściwości pierwiastków i najważniejszych związków chemicznych, wymienia metody ich otrzymywania oraz sposoby analizy;
 K_W03: wyjaśnia zależności pomiędzy strukturą materii a jej obserwowanymi właściwościami;
 K_U01: identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę;
 K_U08: przygotowuje i prezentuje wystąpienia ustne z różnych dziedzin chemii i nauk pokrewnych w języku polskim i angielskim, wykorzystując nabytą wiedzę i umiejętności oraz różnorodne źródła informacji naukowej
 K_K01: identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego doskonalenia się oraz rozwoju osobistego;

Wiedza

- Student zna podstawowe procesy fizykochemiczne odpowiedzialne za funkcjonowanie przyrody..
- Student: definiuje kryształ, rysuje różne typy komórek elementarnych, charakteryzuje różne układy krystalograficzne, odróżnia sieć krystaliczną od sieci przestrzennej, wyjaśnia w jaki sposób ustala się strukturę przestrzenną związków chemicznych metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej monokryształów.
- Student: wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSPR zgodnie z zaleceniami OECD, podaje przykłady kilku deskryptorów struktury chemicznej wykorzystywanych w modelach QSPR.
- Student: zna i rozumie przyczyny powstawania zjawisk foto -i chemiluminescencji; wie jak można wyznaczyć parametry widm luminescencji; rozpoznaje najważniejsze reakcje chemiczne z udziałem pirydyn i akrydyn.
- Student zna i rozumie podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w chemii - ab initio, półempirycznych oraz teorii funkcjonałów gęstości elektronowej (DFT); zna metody obliczeniowe optymalizacji geometrii, określania parametrów fizykochemicznych oraz przewidywania charakterystyk spektralnych cząsteczek organicznych.
- Student charakteryzuje i rozumie metodę PCR oraz jej modyfikacje i zastosowania praktyczne; wie jak się projektuje startery DNA oraz jakie są warunki reakcji PCR..

Umiejętności

- Student umie analizować i rozwiązywać problemy z chemii na podstawie zdobytej wiedzy

Kompetencje społeczne (postawy)

- dostrzega korzyści wynikające ze stosowania metod QSPR w kontekście społecznym (ograniczenie ilości eksperymentów, zmniejszenie ilości wytwarzanych odpadów) oraz ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);
- rozumie znaczenie metod obliczeniowych w chemii, zmierzających do ograniczenia ilości generowanych odpadów poprzez przewidywanie teoretyczne zachowania układów chemicznych
- wykazuje dociekliwość i kreatywność w samodzielnym pozyskiwaniu informacji i zdobywaniu wiedzy.
- rozumie potrzebę ustawicznego kształcenia się związanego z szybkim postępem nauki.
- angażuje się w rozwiązywanie problemów naukowych.

Kontakt

karol.krzyminski@ug.edu.pl