

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Fizykochemia związków kompleksowych		13.3.0615	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Ogólnej i Nieorganicznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia i technologia środowiska, chemia biomedyczna, chemia
		specjalnościowy	obliczeniowa, analityka i diagnostyka chemiczna
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, prof. dr hab. inż. Lech Chmurzyński; prof. UG, dr hab. Aleksandra Dąbrowska; dr Joanna Makowska; prof. UG, dr hab. Dagmara Jacewicz; prof. UG, dr hab. Mariusz Makowski; dr Dariusz Wyrzykowski			
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 pkt. ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 zimowy			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
fakultatywny (do wyboru)	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
	Sposób zaliczenia		
	Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
	- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru		
- Wykład problemowy	- wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja		
- Wykład z prezentacją multimedialną	Podstawowe kryteria oceny		
	pozytywna ocena z kolokwium obejmujących tematykę wykładu monograficznego		
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student poprawnie rozwiązuje testy, związane z analizą chemiczną związków i technikami fizykochemicznymi (K_W05); rozwiązując testy, potrafi zastosować wiedzę ogólną z chemii do wskazania poprawnych odpowiedzi na zadane pytania (K_W11).			
Sposób weryfikacji osiągnięć w zakresie kompetencji społecznych:			
Podczas opracowywania wyników badań oraz problemów teoretycznych, student potrafi wskazać braki w swojej wiedzy i uzupełnić je, wyszukując i cytując literaturę przedmiotu oraz uczestnicząc w konsultacjach z nauczycielem (K_K01).			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
chemia ogólna, chemia nieorganiczna, chemia analityczna, chemia fizyczna, chemia organiczna, chemia koordynacyjna, chemia kwantowa.			
B. Wymagania wstępne			
wiedza z zakresu: chemii ogólnej, nieorganicznej, analitycznej i koordynacyjnej; znajomość metod instrumentalnych służących charakteryzowaniu substancji chemicznych; znajomość i umiejętność stosowania programów komputerowych: pakiet Microsoft Office i pakiet Chem Office.			
Cele kształcenia			

- przedstawienie rozwoju badań fizykochemicznych w fazach stałej i ciekłej na przestrzeni ostatniego stulecia,
- zaznajomienie z podstawowymi metodami instrumentalnymi używanymi podczas charakteryzowania substancji badanych w pracach naukowych,
- przedstawienie różnorodności prac naukowych realizowanych pod opieką pracowników KChOIiN,
- wyrobienie umiejętności samodzielnego zaplanowania pracy eksperymentalnej i rozwiązywania problemów związanych z preparatyką
- przygotowanie do samodzielnego doboru literatury naukowej, prowadzące w konsekwencji do przygotowania rozprawy magisterskiej.

Treści programowe

Zastosowanie metod STA-DSC-MS oraz STA-FTIR w chemii związków koordynacyjnych (opis urządzeń pomiarowych TG-DSC-MS oraz STA-FTIR, sposoby prezentacji i interpretacji wyników); wpływ różnych czynników na wyniki pomiarów w analizie termicznej (analiza wpływu rodzaju i kształtu tygla, masy próbki, szybkości ogrzewania, sposobu przygotowania próbek, atmosfery pieca na przebieg analizy termicznej); ocena błędów w przypadku bezpośrednich pomiarów wielkości fizycznych, analiza pomiarów temperatury topnienia badanego metalu metodą DSC: ocena odchylenia wyniku pomiaru od średniej arytmetycznej; ocena błędu pojedynczego pomiaru; ocena błędu średniej arytmetycznej; ocena błędów w przypadku wielkości fizycznych mierzonych pośrednio; badanie reakcji tworzenia się kompleksów w roztworach metodą kalorymetryczną; cele i metody badania tworzenia się kompleksów w roztworze: praktyczne znaczenie chemii związków kompleksowych, klasyczna metoda preparatywna, wady metody preparatywnej, własność układów a czynniki wpływające na ich równowagę; rozwój badań procesów tworzenia się kompleksów w roztworze: praca Abbega i Bodlandera, praca Ostromyslenskigo, Joba i innych, analiza fizykochemiczna; termodynamiczna charakterystyka procesu kompleksowania: trwałość chemiczna związku, parametry termodynamiczne procesu kompleksowania, równowagi reakcji w roztworach wodnych i ich charakterystyka ilościowa, stałe trwałości i metody ich wyznaczania, czynniki wpływające na trwałość związków kompleksowych; teoria twardych i miękkich kwasów i zasad (HSAB); węglowodany jako ligandy (grupy donorowe, konformacja, efekty steryczne, właściwości kompleksów z ligandami cukrowymi; metody badania struktury połączeń koordynacyjnych jonów metali z cukrami); kinetyczne badania reakcji uwodnienia ligandów szczawianowych i ich pochodnych indukowanych jonami Fe^{3+} w połączeniach koordynacyjnych jonów metali przejściowych; nieredoksowe mechanizmy wiązania i aktywacji substratu (egzopeptydazy, endopeptydazy, enzymy hydrolityczne fosfatazy, enzymy katalizujące addycję nukleofilową grup OH^- lub H^+); kinetyczne badania reakcji izomeryzacji $\text{trans} \rightarrow \text{cis}$ jonów koordynacyjnych metali przejściowych. Kinetyczne badania reakcji wychwytu ditlenku węgla przez połączenia koordynacyjne jonów metali Cr(III) i Co(III) . Oddziaływanie jonu Cr(III) ze składnikami komórek.

B. Problematyka seminarium: analiza wyników STA-DSC-MS oraz STA-FTIR (wyznaczanie równań reakcji rozkładu termicznego związków nieorganicznych i koordynacyjnych); analiza ilościowa składu próbki na podstawie wyników termogravimetrycznych (rozwiązywanie zadań); analiza pomiarów bezpośrednich – ocena błędów (analiza pomiarów masy próbki metalu; rozwiązywanie zadań: ocena odchylenia wyniku pomiaru od średniej arytmetycznej, ocena błędu pojedynczego pomiaru, ocena błędu średniej arytmetycznej); analiza pomiarów pośrednich – ocena błędów (wyznaczanie stałej dysocjacji oraz granicznego przewodnictwa molowego z pomiarów przewodnictwa w funkcji stężenia metodą Krausa i Braya, oszacowanie błędów wyników); sposoby wyznaczania stałej tworzenia oraz parametrów termodynamicznych reakcji powstawania kompleksów w roztworach metodą ITC (rozwiązywanie problemów); analiza wpływu pH na stopień protonowania liganda w roztworze; wyznaczanie stałej tworzenia oraz parametrów termodynamicznych reakcji tworzenia się kompleksów niezależnych od rodzaju roztworu buforowego oraz pH środowiska; omówienie przykładowych widm elektronowych dla poruszanych na wykładzie prac Abbega i Bodlandera, Ostromyslenskigo, Joba; dyskusja i rozwiązywanie problemów dotyczących diagramów ustalania składu związków kompleksowych; przeliczanie, wykreślanie krzywych wyznaczających stechiometrię tworzenia związków kompleksowych kobaltu(II), niklu(II), żelaza(II) z $\text{N,N}'$ -, O,N -donorowymi ligandami organicznymi w roztworach wodnych; dyskusja i rozwiązywanie problemów dotyczących teorii miękkich i twardych kwasów i zasad oraz wpływu efektów energetycznych na proces tworzenia się kompleksów; rozwiązywanie problemów dotyczących wpływu rodzaju jonu centralnego i rodzaju liganda na zdolności kompleksotwórcze; rozwiązywanie problemów dotyczących zdolności kompleksotwórczych węglowodanów; rozwiązywanie problemów (diagramy LCAO MO, termy, efektywny moment magnetyczny, diagramy Tanabe-Sugano (T-S), diagramy Orgela); wyznaczanie rzędu reakcji; wyznaczenie parametrów kinetycznych transformacji izomeru trans w cis z pomiarów spektroskopowych w zakresie widzialnym; analiza globalna; wyznaczanie parametrów aktywacji; oszacowanie błędów wyników; rozwiązywanie zadań z zakresu równowag w roztworach związków kompleksowych, równowag w układach heterogenicznych zawierających trudno rozpuszczalny elektrolit.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

A. Bielański – Podstawy chemii nieorganicznej

J. D. Lee – Zwięzła chemia nieorganiczna

P. Pauling, P. Pauling – Chemia

G. Griffin – Research methods for English studies

L. Arnaut, S. Formosinho, H. Burrows – Chemical kinetics from molecular structure to chemical reactivity

R. J. Willson – Isothermal microcalorimetry: theoretical development and experimental studies

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

J. Inczedy – Równowagi kompleksowania w chemii analitycznej

A. Hulanicki – Reakcje kwasów i zasad w chemii analitycznej

H. S. Rossotti, F.J.C. Rossotti – Równowagi jonowe

F. A. Cotton, G. Wilkinson, P.L. Gaus – Chemia nieorganiczna. Podstawy

A. Bartecki – Barwa związków metali

A. Frost, R. Pearson – Kinetics and mechanism

B. Literatura uzupełniająca

A. Bartecki – Chemia pierwiastków przejściowych S.F.A Kettle – Fizyczna chemia nieorganiczna na przykładzie chemii koordynacyjnej J. Polster, H. Lachmann – Spectrometric titrations: analysis of chemical equilibria	
Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe) K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności; K_W11: wykazuje się ogólną wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie; K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;	Wiedza Potrafi stosować metody STA-DSC-MS oraz STA-FTIR w odniesieniu do chemii związków koordynacyjnych; wie jaki wpływ mają różne czynniki na wyniki pomiarów w analizie termicznej; umie ocenić błędy w przypadku bezpośrednich pomiarów wielkości fizycznych; umie opisać efekty energetyczne towarzyszące reakcjom powstawania i rozpadu związków koordynacyjnych; potrafi zdefiniować i scharakteryzować węglowodany jako ligandy kompleksotwórcze; charakteryzuje i rozumie stechiometrię równowag kwasowo-zasadowych, reakcji trwałości zachodzących w roztworach wodnych kompleksów metali przejściowych; rozumie przebieg i opis procesów kinetycznych reakcji izomeryzacji kompleksów, reakcji uwadniania jonów szczawianowych i ich pochodnych indukowanych jonami Fe(III); wyjaśnia i tłumaczy badania kinetyczne reakcji wychwytu ditlenku węgla przez połączenia koordynacyjne jonów metali Cr³⁺ i Co³⁺.
	Umiejętności
	Kompetencje społeczne (postawy) Wykazuje kreatywność w interpretacji uzyskiwanych wyników badań przy okazji wykonywania pracy magisterskiej; wykazuje powiązania pomiędzy realizowaną tematyką badawczą a życiem, aplikacją otrzymywanych w toku badań związków: kompleksowych jonów metali przejściowych, peptydów; chętnie dyskutuje o potencjalnej użyteczności gospodarczej jako efekt swojej pracy naukowej; docenia i propaguje tematykę realizowaną w Katedrze Chemii Ogólnej i Nieorganicznej.
Kontakt lech.chmurzynski@ug.edu.pl	