

**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Laboratorium zaawansowanej chemii - fizykochemia		13.3.0485	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Fizycznej.			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia i technologia środowiska, analityka i
		specjalnościowy	diagnostyka chemiczna, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
dr hab. Artur Sikorski, profesor uczelni; mgr Artur Mirocki; dr hab. Karol Krzymiński, profesor uczelni; dr inż. Beata Zadykowicz; dr Magdalena Zdrowowicz-Żamojć			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		2	
Ćw. laboratoryjne		zajęcia 20 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 25 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 20 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2021/2022 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
Wykonywanie doświadczeń		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		zaliczenie testowe	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		Zespołowe (grupy 2-4 osobowe) wykonanie części doświadczałnej objętej programem zajęć; opracowanie uzyskanych wyników w postaci sprawozdania; ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie sprawozdania. Zaliczenie części teoretycznej w formie ustnej odpowiedzi na pytania lub odpowiedzi pisemnych (kolokwium)	
		Do otrzymania zaliczenia wymagane jest uzyskanie przynajmniej 50% punktów z każdego etapu; Niewykonanie części doświadczałnej albo nie przedłożenie prawidłowo wykonanego sprawozdania oznacza niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych.	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się</b>			

**Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:**

W pytaniach zaliczeniowych student podaje i tłumaczy podstawowe prawa fotochemiczne, podaje przykłady substancji fluorozujących i ich zastosowania (K\_W01), przytacza wymogi konieczne do zajścia procesu chemiluminescencji, podaje znaczenie parametrów parametrów uzyskanych w drodze pomiaru emisji promieniowania z roztworów (K\_W03), wyjaśnia zasadę działania luminometru lub fluorymetru lub zestawu do HPLC (K\_W10), referuje zasady pracy podczas wykonywania czułych analiz chemicznych.

W pytaniach zaliczeniowych student podaje i tłumaczy podstawowe teoretyczne metod chemii kwantowej, interpretuje i tłumaczy dane obliczeniowe dotyczące właściwości spektralnych układów (K\_W01), interpretuje i tłumaczy dane obliczeniowe dotyczące właściwości fizykochemicznych układów, dobiera metody chemii kwantowej do opisu i modelowania procesów chemicznych (K\_W07), wyjaśnia zasadę działania programów Molden, Gaussian (K\_W10).

**Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:**

Student przygotowuje w grupie sprawozdanie z ćwiczeń (K\_U08), współpracuje z osobami posługującymi się językiem angielskim w czasie wykonywania ćwiczeń i w podczas pracy nad opracowaniem danych (K\_U08), dokonuje selekcji kolumn chromatograficznych pod kątem jakości rozdzielania chromatograficznego na podstawie samodzielnie wyznaczonych parametrów lub ocenia przydatność technik emisyjnych w analizie chemicznej (K\_U01, K\_U02),

Wykonuje wykresy kalibracyjne i odczytuje na ich podstawie parametry analityczne, wyznacza i tłumaczy stałe szybkości reakcji chemicznej na podstawie danych eksperymentalnych.

Student interpretuje i tłumaczy dane otrzymane metodami kwantowo-chemicznymi (K\_U02), stosuje podstawowe prawa chemii fizycznej do obróbki wyników kwantowo-chemicznych, tłumaczy wpływ podstawników na właściwości układów chemicznych, przygotowuje w grupie merytorycznie poprawne i kompletne sprawozdanie z ćwiczeń (K\_U08).

**Sposób weryfikacji nabycia kompetencji społecznych:**

Ocena zachowania Studenta: Student uwzględni wskazówki przekazane podczas ćwiczeń w sprawozdaniu, aktywnie pracuje w grupie w czasie wykonywania zajęć, współpracuje ze studentami anglojęzycznymi, krytycznie analizuje problemy fizykochemiczne nie mające jednoznacznego rozwiązania, wykazuje się zrozumieniem i dbałością o minimalizację ilości generowanych odpadów chemicznych (K\_K01).

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

Rentgenowska analiza strukturalna; Pomiary dyfraktometryczne; Reguła wygaszeń; Prawo Friedla; Metody monokrystaliczne (Lauego, Weissenberga, obracanego kryształu, retigramu); Wyznaczanie struktur krystalicznych; Krystalizacja i monokryształy; Obróbka danych krystalograficznych; Rozwiązywanie i udokładnianie struktury krystalicznej.

Diagram Jabłońskiego; Prawo Lamberta-Beera; procesy promieniste i bezpromieniste; Rodzaje pasm absorpcyjnych w widmie UV-Vis; Powstawanie widm emisyjnych; Podstawowe pojęcia i prawa fotochemiczne; Zastosowanie fluorescencji; Układy fluorozujące i chemiluminescencyjne; Wymogi do zajścia procesu CL; Parametry eksperymentalne opisujące proces CL; Zastosowanie związków luminescencyjnych; Budowa i wymogi wobec znaczników luminescencyjnych.

Współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezyjskie; Metody ab initio, półempiryczne oraz teoria funkcjonału gęstości; Optymalizacja geometrii, określanie właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek chemicznych; Wyznaczanie efektów solwatacyjnych; Termodynamika reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej; Przewidywanie charakterystyk widmowych metodami mechaniki kwantowej.

**B. Wymagania wstępne**

Znajomość języka angielskiego; Podstawowa znajomość środowiska MS Office (Excel, Word) lub pokrewnych programów; Znajomość podstaw analizy błędów pomiarowych.

**Cele kształcenia**

Zapoznanie praktyczne z wybranymi zastosowaniami spektroskopii emisyjnej związków organicznych - fluorescencji (FLU), chemiluminescencji (CL) i absorpcji elektronowej (UV-Vis).

Zapoznanie praktyczne z metodami standaryzacji kolumn chromatograficznych.

Zapoznanie teoretyczne z zagadnieniami fizykochemii procesów emisyjnych, metodami znakowania luminescencyjnego związków biologicznych.

Zdobycie umiejętności obsługi aparatury badawczej do pomiarów widm emisyjnych (FLU lub CL) i absorpcyjnych (UV-Vis) lub wysokosprawnego chromatografu cieczowego (HPLC).

Zapoznanie z metodami obróbki danych i interpretacji widm elektronowych (CL, FLU, UV-Vis).

Zapoznanie z podstawami teoretycznymi rentgenografii strukturalnej monokryształów.

Poznanie podstaw samodzielnego prowadzenia eksperymentu z zakresu rentgenografii strukturalnej.

Poznanie podstaw samodzielnego prowadzenia eksperymentu z zakresu spektroskopii emisyjnej lub chromatografii cieczowej.

Zapoznanie z metodami obliczeniowymi stosowanymi do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym.

Poznanie podstaw samodzielnego prowadzenia obliczeń kwantowo-chemicznych.

Poznanie podstaw samodzielnego opracowywania i interpretacji danych otrzymanych w obliczeniach kwantowo-chemicznych.

**Treści programowe**

Rentgenowska analiza strukturalna; Pomiary dyfraktometryczne; Reguła wygaszeń; Prawo Friedla; Metody monokrystaliczne (Lauego, Weissenberga, obracanego kryształu, retigramu); Wyznaczanie struktur krystalicznych; Krystalizacja i monokryształy; Obróbka danych

krystalograficznych; Rozwiązywanie i udokładnianie struktury krystalicznej.

Diagram Jabłońskiego; Prawo Lamberta-Beera; procesy promieniste i bezpromieniste; Rodzaje pasm absorpcyjnych w widmie UV-Vis; Powstawanie widm emisyjnych; Podstawowe pojęcia i prawa fotochemiczne; Zastosowanie fluorescencji; Układy fluoryzujące i chemiluminescujące; Wymogi do zajęcia procesu CL; Parametry eksperymentalne opisujące proces CL; Zastosowanie związków luminescujących; Budowa i wymogi wobec znaczników luminescencyjnych.

Współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezjańskie; Metody ab initio, półempiryczne oraz teoria funkcjonału gęstości; Optymalizacja geometrii, określanie właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek chemicznych; Wyznaczanie efektów solwatacyjnych;

Termodynamika reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej; Przewidywanie charakterystyk widmowych metodami mechaniki kwantowej.

### Wykaz literatury

- P.W. Atkins, Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001.
- S. Paszyc, „Podstawy fotochemii”, Wydawnictwo naukowe PWN, Warszawa, 1992.
- P. Suppan, Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997.
- W. Zieliński, A. Rajca (red.), Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, PWN, Warszawa, 1995..
- A. M. Garcia-Campana, W.R. G. Bayenes, „Chemiluminescence in Analytical Chemistry”, Marcel Dekker, Inc., New York 2001.
- J. Rak, P. Skurski, J. Błażejowski (1999). J. Org. Chem., 64, 3002–3008.
- Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, Krystalografia, Wydawnictwo naukowe PWN, 1996.
- Z. Trzaska Durski, H. Trzaska Durska, Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenografii, PWN, 1994.
- P. Luger, Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN, 1989.
- A. F. Wells, Strukturalna chemia nieorganiczna, WNT, 1993.
- T. Penkala, Zarys Krystalografii, PWN, 1976.
- J.B. Foresman, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc., 1996.
- L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, 2011.
- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.

### Kierunkowe efekty uczenia się

K\_W01: operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych;  
 K\_W03: wykazuje się pogłębioną wiedzą w zakresie nowoczesnych technik pomiarowych stosowanych w analizie chemicznej;  
 K\_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o wyższym stopniu złożoności;  
 K\_W10: operuje wiedzą dotyczącą zasad działania aparatury naukowo-badawczej stosowanej w chemii;  
 K\_U01: planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o pogłębionym stopniu złożoności;  
 K\_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy;  
 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: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;

### Wiedza

Zna podstawy teoretyczne rentgenowskiej analizy strukturalnej.  
 Zna metody badań monokrystalicznych.  
 Zna podstawy praktyczne pomiarów dyfraktometrycznych z udziałem najnowszej aparatury badawczej firmy Oxford Instruments.  
 Zna zasady obróbki danych krystalograficznych, rozwiązywania i udokładniania struktury krystalicznej.  
 Wie na czym polegają i jakie są warunki zajęcia procesów emisyjnych w cząsteczkach organicznych.  
 Zna i rozumie diagram energetyczny układu luminescującego oraz niektóre mechanizmy powstawania CL (w przypadku tzw. estrów akrydyniowych i luminolu).  
 Zna podstawy prawa fotochemiczne i podstawy fizykochemiczne procesu absorpcji promieniowania elektromagnetycznego i podczerwonego.  
 Potrafi objaśnić losy cząsteczek elektronowo wzbudzonych, posługując się diagramem Jabłońskiego.  
 Podaje przykłady substancji zdolnych do luminescencji i ich najważniejsze zastosowania.  
 Zna najważniejsze parametry, za pomocą których opisuje się procesy emisyjne (wydajność CL, stała szybkości zaniku CL, wydajność kwantowa fluorescencji).  
 Wie do czego służą, jak są zbudowane i jakie są wymogi dla luminescencyjnych znaczników chemicznych.  
 Rozróżnia i charakteryzuje rodzaje chromatografii.  
 Zna i wyjaśnia podstawowe parametry opisujące układ chromatograficzny (HPLC): selektywność, rozdzielczość, współczynnik retencji, półka teoretyczna, asymetria i ogonowanie sygnału.  
 Zna elementy i zasadę działania systemu HPLC.  
 Zna typy wypełnień kolumn chromatograficznych.  
 Wie, jakie są zastosowania chromatografii HPLC i TLC.  
 Zna podstawy metod obliczeniowych stosowanymi do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym.  
 Zna podstawy praktyczne obliczeń kwantowo-chemicznych z wykorzystaniem oprogramowania Gaussian.  
 Zna zasady obróbki danych obliczeniowych oraz interpretacji.

### Umiejętności

Zna podstawy obsługi luminometru płytkowego lub spektrofluorymetru stacjonarnego lub podstawowego zestawu do chromatografii HPLC;  
Potrafi dokonać jakościowej analizy widm emisyjnych luminoforów organicznych;  
Dokonuje analizy ilościowej mieszaniny na podstawie pomiaru widm fluorescencji;  
Potrafi przeprowadzić podstawowe testy jakości kolumn chromatograficznych stosując wybrany test diagnostyczny;  
Stosuje podstawowe równania wykorzystywane w rentgenowskiej analizie strukturalnej monokryształów;  
Interpretuje wyniki otrzymane metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej;  
Krystalizuje związki chemiczne, dokonuje wyboru monokryształów i przeprowadza ich badania wstępne pod kątem przydatności do badań krystalograficznych.  
Zna podstawy obsługi programów Molden i Gaussian.  
Interpretuje wyniki otrzymane metodami chemii obliczeniowej.  
Stosuje podstawowe prawa chemii fizycznej w obróbce danych otrzymanych metodami kwantowo-chemicznymi.

**Kompetencje społeczne (postawy)**

Pracuje w grupie: wspólnie wykonuje pomiary, analizuje i opracowuje wyniki badań.  
Wykazuje odpowiedzialność za terminowe wykonanie zadań badawczych.  
Rozumie potrzebę pogłębiania wiedzy i dalszego kształcenia.  
Potrafi pozyskać i opracować informacje pochodzące z różnych źródeł (oryginalna literatura naukowa, monografie, internet).  
Rozumie potrzebę śledzenia aktualnej literatury przedmiotu, wykazuje kreatywność w samodzielnym pozyskiwaniu i przetwarzaniu informacji naukowej.  
Wykazuje zaangażowanie w zadanie, związane z badawczym charakterem ćwiczeń i możliwością zaznajomienia się z nowoczesnym sprzętem badawczym wysokiej klasy.  
Przestrzega procedur bezpieczeństwa w pracy laboratoryjnej.

**Kontakt**

artur.sikorski@ug.edu.pl