


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


| | | | |
|--|-----------------|--|---|
| Nazwa przedmiotu | | Kod ECTS | |
| Laboratorium zaawansowanej chemii - fizykochemia | | 13.3.0485 | |
| Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot | | | |
| Katedra Chemii Fizycznej. | | | |
| Studia | | | |
| wydział | kierunek | poziom | drugiego stopnia |
| Wydział Chemii | Chemia | forma | stacjonarne |
| | | moduł | chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia i |
| | | specjalnościowy | technologia środowiska, chemia obliczeniowa |
| | | specjalizacja | wszystkie |
| Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) | | | |
| dr hab. Artur Sikorski, profesor uczelni; dr hab. Karol Krzymiński, profesor uczelni; mgr inż. Małgorzata Rybczyńska; dr Magdalena Zdrowowicz-Żamojć; mgr Artur Mirocki; dr inż. Beata Zadykowicz; mgr Kamila Butowska | | | |
| Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin | | Liczba punktów ECTS | |
| Formy zajęć | | 2 | |
| Ćw. laboratoryjne | | zajęcia 20 godz. | |
| Sposób realizacji zajęć | | konsultacje 5 godz. | |
| zajęcia w sali dydaktycznej | | praca własna studenta 25 godz. | |
| Liczba godzin | | RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS | |
| Ćw. laboratoryjne: 20 godz. | | | |
| Termin realizacji przedmiotu | | | |
| 2022/2023 zimowy | | | |
| Status przedmiotu | | Język wykładowy | |
| obowiązkowy | | polski | |
| Metody dydaktyczne | | Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne | |
| Wykonywanie doświadczeń | | Sposób zaliczenia | |
| | | Zaliczenie na ocenę | |
| | | Formy zaliczenia | |
| | | zaliczenie testowe | |
| | | Podstawowe kryteria oceny | |
| | | 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. | |
| Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się | | | |

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

W pytaniach zaliczeniowych student podaje i tłumaczy podstawowe prawa fotochemiczne, podaje przykłady substancji fluoryzujących 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 nabrania 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 fluoryzujące 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

| | |
|--|--|
| <p>krystalograficznych; Rozwiązywanie i udokładnianie struktury krystalicznej.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> | |
| <p>Wykaz literatury</p> <p>1. P.W. Atkins, Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001.</p> <p>2. S. Paszyc, „Podstawy fotochemii”, Wydawnictwo naukowe PWN, Warszawa, 1992.</p> <p>3. P. Suppan, Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997.</p> <p>4. W. Zieliński, A. Rajca (red.), Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, PWN, Warszawa, 1995..</p> <p>5. A. M. Garcia-Campana, W.R. G. Bayenes, „Chemiluminescence in Analytical Chemistry”, Marcel Dekker, Inc., New York 2001.</p> <p>6. J. Rak, P. Skurski, J. Błażejowski (1999). J. Org. Chem., 64, 3002–3008.</p> <p>7. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, Krystalografia, Wydawnictwo naukowe PWN, 1996.</p> <p>8. Z. Trzaska Durski, H. Trzaska Durska, Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenografii, PWN, 1994.</p> <p>9. P. Luger, Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN, 1989.</p> <p>10. A. F. Wells, Strukturalna chemia nieorganiczna, WNT, 1993.</p> <p>11. T. Penkala, Zarys Krystalografii, PWN, 1976.</p> <p>12. J.B. Foresman, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc. ,1996.</p> <p>13. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, 2011.</p> <p>14. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.</p> | |
| <p>Kierunkowe efekty uczenia się</p> <p>K_W01: operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych;</p> <p>K_W03: wykazuje się pogłębioną wiedzą w zakresie nowoczesnych technik pomiarowych stosowanych w analizie chemicznej;</p> <p>K_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o wyższym stopniu złożoności;</p> <p>K_W10: operuje wiedzą dotyczącą zasad działania aparatury naukowo-badawczej stosowanej w chemii;</p> <p>K_U01: planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o pogłębionym stopniu złożoności;</p> <p>K_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy;</p> <p>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;</p> <p>K_K01: zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby;</p> | <p>Wiedza</p> <p>Zna podstawy teoretyczne rentgenowskiej analizy strukturalnej.</p> <p>Zna metody badań monokrystalicznych.</p> <p>Zna podstawy praktyczne pomiarów dyfraktometrycznych z udziałem najnowszej aparatury badawczej firmy Oxford Instruments.</p> <p>Zna zasady obróbki danych krystalograficznych, rozwiązywania i udokładniania struktury krystalicznej.</p> <p>Wie na czym polegają i jakie są warunki zajęcia procesów emisyjnych w cząsteczkach organicznych.</p> <p>Zna i rozumie diagram energetyczny układu luminescującego oraz niektóre mechanizmy powstawania CL (w przypadku tzw. estrów akrydyniowych i luminolu).</p> <p>Zna podstawy prawa fotochemiczne i podstawy fizykochemiczne procesu absorpcji promieniowania elektromagnetycznego i podczerwonego.</p> <p>Potrafi objaśnić losy cząsteczek elektronowo wzbudzonych, posługując się diagramem Jabłońskiego.</p> <p>Podaje przykłady substancji zdolnych do luminescencji i ich najważniejsze zastosowania.</p> <p>Zna najważniejsze parametry, za pomocą których opisuje się procesy emisyjne (wydajność CL, stała szybkości zaniku CL, wydajność kwantowa fluorescencji).</p> <p>Wie do czego służą, jak są zbudowane i jakie są wymogi dla luminescencyjnych znaczników chemicznych.</p> <p>Rozróżnia i charakteryzuje rodzaje chromatografii.</p> <p>Zna i wyjaśnia podstawowe parametry opisujące układ chromatograficzny (HPLC): selektywność, rozdzielczość, współczynnik retencji, półka teoretyczna, asymetria i ogonowanie sygnału.</p> <p>Zna elementy i zasadę działania systemu HPLC.</p> <p>Zna typy wypełnień kolumn chromatograficznych.</p> <p>Wie, jakie są zastosowania chromatografii HPLC i TLC.</p> <p>Zna podstawy metod obliczeniowych stosowanymi do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym.</p> <p>Zna podstawy praktyczne obliczeń kwantowo-chemicznych z wykorzystaniem oprogramowania Gaussian.</p> <p>Zna zasady obróbki danych obliczeniowych oraz interpretacji.</p> |
| | <p>Umiejętności</p> |

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