

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

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Fizykochemia molekuł		13.3.0596	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Fizycznej.			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia kosmetyków, analityka i diagnostyka
		specjalnościowy	chemiczna, chemia żywności
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Karol Krzywiński; dr Lidia Chomicz-Mańka; prof. UG, dr hab. Piotr Storoniak; prof. UG, dr hab. Artur Sikorski; dr inż. Beata Zadykowiec			
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.			
Termin realizacji przedmiotu			
2022/2023 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		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	
		<ul style="list-style-type: none"> • 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			
Sposoby weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student poprawnie rozwiązuje testy jednokrotnego i wielokrotnego wyboru z tematyki dotyczącej źródeł energii odnawialnych (K_W02, K_W03).			
Sposoby weryfikacji nabycia umiejętności:			
Weryfikacja polega na samoocenie efektów kształcenia przez studenta, np. potrafi przewidzieć i zapisać schemat podstawowych równowag ustalających się w roztworach. Prowadzący zajęcia ocenia zaangażowanie studenta w dyskusje na temat zagadnień dotyczących tego przedmiotu m.in. podczas konsultacji (K_U08).			
Sposoby weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Student uczestniczy w konsultacjach i samodzielnie przygotowuje się do zaliczenia przedmiot (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. Podstawy fizykochemiczne procesu fluorescencji, chemiluminescencji i bioluminescencji; Pomiary emisji promieniowania z roztworów; Analiza widm luminescencji; Przykłady zastosowań chemiluminescencji i bioluminescencji w analityce medycznej; Właściwości chemiczne pirydyn i akrydyn, przykłady syntez złożonych; Analizy fizykochemiczne związków heterocyklicznych – powstawanie i pomiary widm magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR), widm masowych (MS).
3. Fizykochemia akrydyn w aspekcie eksperymentalnym i obliczeniowym
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.
6. Wpływ promieniowania wysokoenergetycznego i UV na DNA.

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.

Kierunkowe efekty kształcenia

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_U08: przygotowuje i prezentuje wystąpienia ustne z różnych dziedzin chemii i nauk pokrewnych w języku polskim i angielskim, wykorzystując nabytą wiedzę i

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

<p>umiejętności oraz różnorodne źródła informacji naukowej</p> <p>K_K01: identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego;</p>	<p>chemicznej wykorzystywanych w modelach QSPR.</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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 funkcjonalów 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.. <p>Umiejętności</p> <ul style="list-style-type: none"> - Student umie analizować i rozwiązywać problemy z chemii na podstawie zdobytej wiedzy <p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <ul style="list-style-type: none"> - dostrzega korzyści wynikające ze stosowania metod QSPR w kontekście społecznym (ograniczenie ilości eksperymentów, zmniejszenie ilości wytwarzanych odpadów) oraz ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań); - rozumie znacznie 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.
<p>Kontakt</p> <p>karol.krzyminski@ug.edu.pl</p>	