

**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>			
Faculty of Chemistry			
<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>			
prof. UG, dr hab. Karol Krzywiński; dr Artur Sikorski; dr inż. Beata Zadykowicz			
<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>Cykl dydaktyczny</b>			
2017/2018 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 doświadczalnej 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 doświadczalnej albo nie przedłożenie prawidłowo wykonanego sprawozdania oznacza niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych.	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			

**Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:**

W pytaniach zaliczeniowych student podaje i tłumaczy podstawowe prawa fotochemiczne (K\_W02), podaje przykłady substancji fluoryzujących i ich zastosowania (K\_W01), przytacza wymogi konieczne do zajścia procesu chemiluminescencji (K\_W04), podaje znaczenie parametrów parametrów uzyskanych w drodze pomiaru emisji promieniowania z roztworów (K\_W03), zna zasadę działania luminometru lub fluorymetru lub zestawu do HPLC (K\_W10), zna i referuje zasady pracy podczas wykonywania czułych analiz chemicznych (K\_W12).

W pytaniach zaliczeniowych student podaje i tłumaczy podstawowe teoretyczne metody chemii kwantowej (K\_W02), interpretuje i tłumaczy dane obliczeniowe dotyczące właściwości spektralnych układów (K\_W01), interpretuje i tłumaczy dane obliczeniowe dotyczące właściwości fizykochemicznych układów (K\_W04), dobiera metody chemii kwantowej do opisu i modelowania procesów chemicznych (K\_W07), zna zasadę działania programów Molden, Gaussian (K\_W10).

**Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:**

Student przygotowuje w grupie merytorycznie poprawne i kompletne 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\_U02),

Wykonuje wykresy kalibracyjne i odczytuje na ich podstawie parametry analityczne (K\_U04), wyznacza i tłumaczy stałe szybkości reakcji chemicznej na podstawie danych eksperymentalnych (K\_U04)

Student interpretuje i tłumaczy dane otrzymane metodami kwantowo-chemicznymi (K\_U02), stosuje podstawowe prawa chemii fizycznej do obróbki wyników kwantowo-chemicznych (K\_U04), tłumaczy wpływ podstawników na właściwości układów chemicznych (K\_U04), przygotowuje w grupie merytorycznie poprawne i kompletne sprawozdanie z ćwiczeń (K\_U08).

**Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:**

Student uwzględni wskazówki przekazane podczas ćwiczeń w sprawozdaniu (K\_K01), aktywnie pracuje w grupie w czasie wykonywania zajęć (K\_K02), współpracuje ze studentami anglojęzycznymi (K\_K01), krytycznie analizuje problemy fizykochemiczne nie mające jednoznacznego rozwiązania (K\_K01), wykazuje się zrozumieniem i dbałością o minimalizację ilości generowanych odpadów chemicznych (K\_K04).

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

Ukończone kursy w zakresie matematyki, fizyki, chemii ogólnej i chemii fizycznej.

**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 ciekłego (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 ciekłej.

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 dyfrakcyjne; 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.

**Wykaz literatury**

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

**Efekty kształcenia****(obszarowe i kierunkowe)**

- K\_W01: operuje wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych;
- K\_W02: operuje rozszerzoną i pogłębioną wiedzą w zakresie podstawowych działów chemii;
- K\_W03: wykazuje się rozszerzoną wiedzą w zakresie nowoczesnych technik pomiarowych stosowanych w analizie chemicznej;
- K\_W04: stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy;
- K\_W07: dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności;
- K\_W10: operuje wiedzą dotyczącą zasad działania podstawowej aparatury naukowo-badawczej stosowanej w chemii;
- K\_W12: przedstawia zasady bezpieczeństwa i higieny pracy w stopniu pozwalającym na samodzielną pracę na stanowisku badawczym i/lub pomiarowym;
- K\_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy;
- K\_U04: stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych;
- 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;
- K\_K02: pracuje w zespole przyjmując w nim różne role;
- K\_K04: poprawnie identyfikuje i rozstrzyga dylematy związane z wykonywaniem zawodu chemika.

**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 zajścia procesów emisyjnych w cząsteczkach organicznych.
- Zna i rozumie diagram energetyczny układu luminescującego oraz niektóre mechanizmy powstawania CL (w przypadku tzw. estrów akrydynowych 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**

1. 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**

karol.krzyminski@ug.edu.pl