



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wykład monograficzny - Fizykochemia związków kompleksowych		13.3.0478	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Faculty of Chemistry			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia biomedyczna, chemia i technologia środowiska, analityka i
		specjalnościowy	diagnostyka chemiczna, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, prof. dr hab. inż. Lech Chmurzyński; dr Dariusz Wyrzykowski; prof. UG, dr hab. Mariusz Makowski; prof. UG, dr hab. Dagmara Jacewicz; dr hab. Joanna Makowska; dr Agnieszka Chylewska; prof. UG, dr hab. Aleksandra Dąbrowska			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład		zajęcia 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 40 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykład problemowy		Sposób zaliczenia	
- Wykład z prezentacją multimedialną		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		- wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru	
		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 KChOiN,
- 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; nieredoksydacyjne mechanizmy wiązania i aktywacji substratu (egzopeptydazy, endopeptydazy, enzymy hydrolityczne fosfatazy, enzymy katalizujące addycję nukleofilową grup OH^- lub H^+); kinetyczne badania reakcji izomeryzacji $trans \rightarrow cis$ 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; wyznaczenie 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 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); wyznaczenie rzędu reakcji; wyznaczenie parametrów kinetycznych transformacji izomeru $trans$ w cis z pomiarów spektroskopowych w zakresie widzialnym; analiza globalna; wyznaczenie 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 – Związki chemia nieorganiczna

P. Pauling, P. Pauling – Chemia

G. Griffin – Research methods for English studies

L. Arnaut, S. Formosino, 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

<p>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</p>	
<p>Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)</p> <p>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;</p>	<p>Wiedza</p> <p>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⁺.</p>
	<p>Umiejętności</p>
	<p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <p>Wykazuje kreatywność w interpretacji uzyskiwanych wyników badań przy okazji wykonywania pracy magisterskiej; wykazuje powiązania pomiędzy realizowaną tematyką badawczą a życiem, aplikacją otrzymany 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.</p>
<p>Kontakt</p> <p>lech.chmurzynski@ug.edu.pl</p>	