

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Laboratorium zaawansowanej chemii - fizykochemia (Ćw. laboratoryjne), PG_00054411						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski Polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemii -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Karol Krzywiński					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Karol Krzywiński dr inż. Beata Zadykowicz dr Artur Mirocki					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	20.0	0.0	0.0	20
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	20		4.0		26.0	50
Cel przedmiotu	<ul style="list-style-type: none"> Zapoznanie teoretyczne i praktyczne z wybranymi aspektami spektroskopii emisyjnej i chromatografii HPLC; Zdobycie umiejętności obsługi wybranej aparatury do badań fizykochemicznych; Zapoznanie z podstawami teoretycznymi rentgenografii strukturalnej monokryształów; Poznanie podstaw prowadzenia eksperymentu z zakresu rentgenografii strukturalnej; Zapoznanie z metodami obliczeniowymi stosowanymi do opisu układów chemicznych na poziomie molekularnym; Zapoznanie z metodami obróbki danych i interpretacji danych fizykochemicznych. 						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	<ul style="list-style-type: none"> - Student uwzględni w sprawozdaniu wskazówki, przekazane podczas ćwiczeń; - Aktywnie pracuje w grupie w czasie wykonywania zajęć; - Współpracuje aktywnie ze studentami anglojęzycznymi; - Krytycznie analizuje problemy fizykochemiczne o średniej złożoności; - Wykazuje się zrozumieniem problemów zw. z generowaniem odpadów chemicznych i dbałością o minimalizowanie ich ilości. 	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SK5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	<ul style="list-style-type: none"> - Student ocenia przydatność technik emisyjnych w analizie chemicznej; - Dokonuje selekcji kolumn chromatograficznych pod kątem jakości rozdzielenia, na podstawie wyznaczonych parametrów; - Interpretuje i tłumaczy dane otrzymane metodami kwantowo-chemicznymi. 	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[CHEMMU2_U01] Planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o pogłębionym stopniu złożoności.	<ul style="list-style-type: none"> - Student wykonuje wykresy kalibracyjne i odczytuje na ich podstawie parametry analityczne; - Wyznacza i tłumaczy stałe szybkości reakcji chemicznej na podstawie danych eksperymentalnych; - Stosuje podstawowe prawa chemii fizycznej do obróbki wyników kwantowo-chemicznych. 	[SU5] realizacja zadania problemowego [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych
	[CHEMMU2_W10] Operuje wiedzą dotyczącą zasad działania aparatury naukowo-badawczej stosowanej w chemii.	<ul style="list-style-type: none"> - Student wyjaśnia zasadę działania luminometru płytkowego, fluorymetru i zestawu do wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC); - Interpretuje i tłumaczy dane obliczeniowe dotyczące właściwości fizykochemicznych układów; - Wyjaśnia zasadę działania programów Molden i Gaussian. 	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.	<ul style="list-style-type: none"> - Student podaje i tłumaczy podstawowe prawa fotochemiczne; - Podaje przykłady substancji luminescujących i ich zastosowania; - Przytacza wymogi konieczne do zajścia procesu fluorescencji (FL) i chemiluminescencji (CL). - Referuje zasady pracy podczas wykonywania analiz luminometrycznych; - Podaje i tłumaczy podstawowy teoretyczny metod spektroskopowych; - Potrafi wskazać i wytłumaczyć najważniejsze parametry walidacyjne układu do HPLC. - Podaje i tłumaczy podstawowy teoretyczny kwantowo-chemicznych metod obliczeniowych. 	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny [SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja
	[CHEMMU2_W03] Wykazuje się pogłębioną wiedzą w zakresie nowoczesnych technik pomiarowych stosowanych w analizie chemicznej.	<ul style="list-style-type: none"> - Student podaje znaczenie parametrów uzyskanych w drodze pomiaru emisji promieniowania (FL, CL) z roztworów; - Student zna i podaje znaczenie najważniejszych parametrów charakteryzujących układ chromatograficzny. - Student podaje znaczenie parametrów parametrów uzyskanych w drodze oblicze kwantowo-chemicznych. 	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW3] opracowanie tekstowe/ praca pisemna [SW5] realizacja zadania problemowego

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	- Student dobiera metody chemii fizycznej do opisu procesów luminescencji (FL, CL) pod względem ich efektywności i kinetyki. - Student dobiera metody chemii kwantowej do opisu i modelowania procesów chemicznych.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_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.	- Student przygotowuje w grupie sprawozdanie z ćwiczeń; - Współpracuje z osobami posługującymi się j. angielskim w czasie wykonywania ćwiczeń i w podczas opracowywania danych; - Zauważa i tłumaczy zależności typu struktura -reaktywność w grupie badanych związków; - Przygotowuje w grupie merytorycznie poprawne i kompletne sprawozdanie z ćwiczeń.	[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
Treści przedmiotu	<p>1. Diagram Jabłońskiego; Prawo Lamberta-Beera; procesy promieniste i bezpromieniste; Rodzaje pasm absorpcyjnych w widmie UV-Vis; Powstawanie widm emisyjnych; Podstawowe pojęcia i prawa fotochemiczne; Fizykochemia procesu fluorescencji i chemiluminescencji (FL, CL); Przykłady i zastosowania FL i CL; Pojęcie znacznika i indykatora luminescencji; System chromatograficzny typu HPLC i jego elementy i funkcje, parametry chromatograficzne i ich wyznaczenie; testy walidacyjne kolumn do HPLC.2. Rentgenowska analiza strukturalna; Pomiar dyfrakcyjny; 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.3. 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>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Wymagania wstępne:Znajomość języka angielskiego; Podstawowa znajomość środowiska MS Office (Excel, Word) lub pokrewnych programów; Znajomość podstaw analizy błędów pomiarowych.</p> <p>Wymagania dodatkowe:- Znajomość podstaw rentgenowskiej analizy strukturalnej: Pomiar dyfrakcyjny; Reguła wygaszeń; Prawo Friedla; Metody monokrystaliczne; Wyznaczanie struktur krystalicznych; Krystalizacja i monokryształy; Obróbka danych krystalograficznych; Rozwiązywanie i udokładnianie struktury krystalicznej.- Znajomość podstaw spektroskopii elektronowej: Prawo Lamberta-Beera; Diagram Jabłońskiego; Podstawowe pojęcia i prawa fotochemii; Zastosowania absorpcji UV-Vis i fluorescencji; Obróbka danych spektroskopowych; Podstawy teoretyczne i praktyczne chromatografii HPLC.- Współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezjańskie; Metody ab initio, półempiryczne oraz teoria funkcjonału gęstości; Optymalizacja geometrii, określanie właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek; Wyznaczanie efektów solwatacyjnych; Termodynamika reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej; Przewidywanie charakterystyk widmowych metodami mechaniki kwantowej.</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Sprawozdania z ćwiczeń laboratoryjnych	51.0%	50.0%
	Test teoretyczny	51.0%	50.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<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. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, Krystalografia, Wydawnictwo naukowe PWN, 1996.</p> <p>4. Z. Trzaska Durski, H. Trzaska Durska, Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenografii, PWN, 1994.</p> <p>5. J.B. Foresman, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc., 1996.</p> <p>6. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, 2011.</p>
	Uzupełniająca lista lektur	<p>P. Suppan, Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997.</p> <p>W. Zieliński, A. Rajca (red.), Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, PWN, Warszawa, 1995..</p> <p>A. M. Garcia-Campana, W.R. G. Bayenes, Chemiluminescence in Analytical Chemistry, Marcel Dekker, Inc., New York 2001.</p> <p>Luger, Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN, 1989.</p> <p>A. F. Wells, Strukturalna chemia nieorganiczna, WNT, 1993.</p> <p>T. Penkala, Zarys Krystalografii, PWN, 1976. .</p> <p>F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.</p>
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Część praktyczna - przykłady:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Konstrukcja wykresu kalibracyjnego i odczyt zawartości składnika na podstawie pomiarów emisji FL; - Obliczanie liczby pólk teoretycznych i selektywności na podstawie chromatogramów HPLC - Graficzne wyznaczenie stałych kinetycznych na podstawie zarejestrowanych profili czasowych reakcji (CL). <p>Część teoretyczna - przykłady:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aby zaistniała chemiluminescencja konieczne jest... - Selektywność () to pojęcie które określa... - Proces jasny na diagramie Jabłońskiego to... 	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.