

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład dyplomowy - Fizykochemia molekuł (Wykład), PG_00081850						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski język polski		
Semestr studiów	6	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Piotr Storoniak					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	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	30	5.0		15.0		50
Cel przedmiotu	<p>Zapoznanie studentów z technikami termochemicznymi (TA, DSC, TG).</p> <p>Wprowadzenie do metod obliczeniowych stosowanych do opisu układów chemicznych.</p> <p>Zapoznanie studentów z podstawami teoretycznymi zjawisk luminescencji związków organicznych (fluorescencja, fosforescencja, chemiluminescencja, bioluminescencja) oraz z zastosowaniem tych zjawisk we współczesnej nauce.</p> <p>Zaznajomienie studentów z zastosowaniami teorii termodynamicznej do opisu procesów w przyrodzie.</p> <p>Zapoznanie studentów z zagadnieniem wpływu promieniowania na materiał genetyczny oraz badaniami nad uszkodzaniem DNA przez promieniowanie.</p>						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEML3_W02] Opisuje w zaawansowanym stopniu właściwości pierwiastków i najważniejszych związków chemicznych, wymienia metody ich otrzymywania oraz sposoby analizy.	student zna i rozumie podstawy teoretyczne metod obliczeniowych w chemii: ab initio, półempirycznych oraz teorii funkcjonałów gęstości elektronowej (DFT); zna metody obliczeniowe optymalizacji geometrii, określania parametrów fizykochemicznych oraz przewidywania charakterystyk spektralnych cząsteczek organicznych; student zna i rozumie podstawy fizykochemiczne technik termochemicznych oraz ich zastosowanie; student potrafi określić jakość otrzymanych wyników termochemicznych; student charakteryzuje typy anionorodników jakie mogą pojawić się w układzie biologicznym w wyniku oddziaływania z produktami radiolizy wody; student rozumie metodologię badań eksperymentalnych i obliczeniowych związanych z tematyką uszkodzeń DNA pod wpływem promieniowania	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEML3_K01] Identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego.	wykazuje dociekliwość i kreatywność w samodzielnym pozyskiwaniu informacji i zdobywaniu wiedzy; rozumie znaczenie metod obliczeniowych w chemii, zmierzających do ograniczenia ilości generowanych odpadów poprzez przewidywanie teoretyczne zachowania układów chemicznych	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEML3_W03] Wyjaśnia w zaawansowanym stopniu zależność pomiędzy strukturą materii a jej obserwowanymi właściwościami.	student zna podstawowe procesy fizykochemiczne odpowiedzialne za funkcjonowanie przyrody; student zna i rozumie przyczyny powstawania zjawisk foto -i chemiluminescencji, wie jak można wyznaczyć parametry widm luminescencji; student rozumie znaczenie teorii termodynamicznej dla opisu zjawisk z jakimi można się zetknąć w pracy badawczej jak i w życiu codziennym; student wie na czym polegają procesy uszkodzania nici DNA pod wpływem promieniowania o różnej energii	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEML3_U08] Przedstawia w sposób przystępny, językiem naukowym typowym dla nauk chemicznych fakty z chemii.	na podstawie zdobytej wiedzy student umie analizować i rozwiązywać problemy z dziedziny chemia	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny

Treści przedmiotu	<p>1. Metody termooanalityczne: temperatura - opis fizykochemiczny, podstawowe metody i instrumenty pomiaru temperatury; analiza termiczna - definicja i charakterystyka metod (TGA, DTA, DSC); czynniki wpływające na sygnał w metodach termooanalitycznych.</p> <p>2. Podstawy chemii obliczeniowej: współrzędne wewnętrzne i współrzędne kartezyjskie; wprowadzenie do metod ab initio, półempirycznych oraz teorii funkcjonału gęstości; podstawy teoretyczne baz funkcyjnych; zastosowania chemii kwantowej do optymalizacji geometrii, określania właściwości fizykochemicznych i charakterystyk atomów oraz cząsteczek; obliczeniowe wyznaczanie efektów solwatacyjnych; termodynamika i kinetyka reakcji chemicznych na gruncie chemii kwantowej; przewidywanie charakterystyk widmowych metodami mechaniki kwantowej.</p> <p>3. Metody luminescencyjne: luminescencja - definicja, podział, zakres spektralny; podstawy fizykochemiczne procesu fluorescencji, fosforescencji i chemiluminescencji; pomiary emisji promieniowania z roztworów; analiza widm luminescencji; luminofory - cechy charakterystyczne; mikroskopia fluorescencyjna; przykłady zastosowań fotoluminescencji i chemiluminescencji w analityce chemicznej, medycznej i środowiskowej.</p> <p>4. Termodynamika: zasady termodynamiki, kierunek przemian spontanicznych, jak termodynamika opisuje oddziaływania na poziomie atomowym, równowagi w układach otwartych i zamkniętych, czynniki kontrolujące równowagi pomiędzy fazami, termodynamiczny opis procesów separacyjnych</p> <p>5. Wpływ promieniowania wysokoenergetycznego i UV na DNA: niskoenergetyczne elektrony (low-energy electrons, LEE) jako czynnik genotoksyczny, teoretyczne modelowanie mechanizmów uszkodzania DNA z udziałem stanów anionowych zlokalizowanych na zasadach nukleinowych, termodynamiczne wielkości charakteryzujące tworzenie się i trwałość anionorodników zasad nukleinowych (wertykalne i adyabatyczne powinowactwo do elektronu, wertykalna energia odłączenia elektronu)</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczony przedmiot chemia ogólna oraz chemia fizyczna.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin pisemny, pytania testowe i otwarte	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Materiały w wersji elektronicznej przekazane przez prowadzących 2. A. Kumar, M.D. Sevilla, J. Leszczynski et al. (eds.), Handbook of Computational Chemistry, 2017	
	Uzupełniająca lista lektur	1. Atkins, P.W., Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001. 2. Suppan, P.: Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997. 3. Frisch, E. Frisch M.J.: Gaussian 98 User's Reference, Manual Version: 6.1, January, 1999.	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> 1. Termodynamiczne kryterium przemian spontanicznych 2. Koncepcja entropii, jakim zjawiskom towarzyszy obniżenie entropii układu 3. Na czym polega w świetle teorii termodynamicznej ustalenie się równowagi dla takiego układu separacyjnego zawierającego dwie fazy i substancje rozpuszczone? 4. Na czym polega różnica pomiędzy oddziaływaniami dyspersyjnymi (van der Waalsa) a oddziaływaniami polarnymi? 5. W wyniku oddziaływania pomiędzy elektronem (o energii powyżej 4 eV) i cząsteczką chemiczną może dojść do zjawiska nazywanego rezonansem wzbudzonego rdzenia. Na czym polega to zjawisko? 6. Co opisuje wertykalne powinowactwo do elektronu (VEA)? 7. Czym charakteryzują się aniony dipolowe i jak powstają? 8. Jakie funkcjonały DFT byłyby najlepszym wyborem w celu obliczenia energii aktywacji rozerwania wiązań fosfodiestrowych w DNA pod wpływem przyłączenia nadmiarowego elektronu? 9. W jakim zakresie widmowym występuje wzbudzenie elektronowe w cząsteczkach organicznych? 10. Z jakim przejściem związana jest emisja fluorescencji? 11. Jaka zależność wyznaczana jest w analizie termogravimetrycznej (TG)? 12. Ile wynosi multipletowość jonu, który powstał przez oderwanie elektronu od obojętnej cząsteczki związku organicznego? 		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.