

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Wykład dyplomowy - Fizykochemia molekuł (Wykład), PG_00081850						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2028/2029		
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		
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).  Wprowadzenie do metod obliczeniowych stosowanych do opisu układów chemicznych.  Zapoznanie studentów z podstawami teoretycznymi zjawisk luminescencji związków organicznych (fluorescencja, fosforescencja, chemiluminescencja, bioluminescencja) oraz z zastosowaniem tych zjawisk we współczesnej nauce.  Zaznajomienie studentów z zastosowaniami teorii termodynamicznej do opisu procesów w przyrodzie.  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. <b>Metody termooanalityczne:</b> 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. <b>Podstawy chemii obliczeniowej:</b> 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. <b>Metody luminescencyjne:</b> 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. <b>Termodynamika:</b> 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. <b>Wpływ promieniowania wysokoenergetycznego i UV na DNA:</b> 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	<table border="1" data-bbox="451 943 798 1037"> <tr> <td>Sposób oceniania (składowe)</td> <td>Próg zaliczeniowy</td> <td>Składowa oceny końcowej</td> </tr> <tr> <td>egzamin pisemny, pytania testowe i otwarte</td> <td>51.0%</td> <td>100.0%</td> </tr> </table>	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	egzamin pisemny, pytania testowe i otwarte	51.0%	100.0%		
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej							
egzamin pisemny, pytania testowe i otwarte	51.0%	100.0%							
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <p>Adresy eZasobów</p>	<p>1. Materiały w wersji elektronicznej przekazane przez prowadzących</p> <p>2. A. Kumar, M.D. Sevilla, J. Leszczynski et al. (eds.), Handbook of Computational Chemistry, 2017</p> <p>1. Atkins, P.W., Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001.</p> <p>2. Suppan, P.: Chemia i światło, PWN, Warszawa 1997.</p> <p>3. Frisch, E. Frisch M.J.: Gaussian 98 User's Reference, Manual Version: 6.1, January, 1999.</p>							
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Termodynamiczne kryterium przemian spontanicznych</li> <li>2. Koncepcja entropii, jakim zjawiskom towarzyszy obniżenie entropii układu</li> <li>3. Na czym polega w świetle teorii termodynamicznej ustalenie się równowagi dla takiego układu separacyjnego zawierającego dwie fazy i substancje rozpuszczone?</li> <li>4. Na czym polega różnica pomiędzy oddziaływaniami dyspersyjnymi (van der Waalsa) a oddziaływaniami polarnymi?</li> <li>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?</li> <li>6. Co opisuje wertykalne powinowactwo do elektronu (VEA)?</li> <li>7. Czym charakteryzują się aniony dipolowe i jak powstają?</li> <li>8. Jakie funkcjonały DFT byłby najlepszym wyborem w celu obliczenia energii aktywacji rozerwania wiązań fosfodiestrowych w DNA pod wpływem przyłączenia nadmiarowego elektronu?</li> <li>9. W jakim zakresie widmowym występuje wzbudzenie elektronowe w cząsteczkach organicznych?</li> <li>10. Z jakim przejściem związana jest emisja fluorescencji?</li> <li>11. Jaka zależność wyznaczana jest w analizie termogravimetrycznej (TG)?</li> <li>12. Ile wynosi multipletowość jonu, który powstał przez oderwanie elektronu od obojętnej cząsteczki związku organicznego?</li> </ol>								
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy								

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.