



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Hydratation of molecules and molecular interactions, PG_00037601						
Kierunek studiów	Green Technologies						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2020 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	4	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	7	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	15.0	0.0	0.0	45
	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	45		3.0		27.0	75
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów ze zjawiskiem hydratacji od strony fizykochemicznej, ze zwróceniem szczególnej uwagi na oddziaływania międzycząsteczkowe występujące w roztworach wodnych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[K6_W03] ma podstawową wiedzę z zakresu ochrony gleby, powietrza i wody przed zanieczyszczeniami i nadzorowania technologii przyjaznych dla środowiska oraz technologii bezodpadowych, technologii oczyszczania i neutralizacji odpadów przemysłowych, gospodarki wodno-ściekowej oraz podstaw teoretycznych metod i typów aparatów stosowanych w analizie zanieczyszczeń środowiska</p> <p>has a basic knowledge of soil, air and water pollutants, design and supervision of environmentally friendly technologies and technologies which do not produce waste, knows technology of cleaning and neutralization of industrial waste and wastewater management, has a basic understanding of the theoretical basis of methods and types of apparatus used in chemical analysis of environmental pollutants</p>	<p>Student rozumie pojęcie hydratacji na poziomie mikroskopowym i potrafi opisać charakterystyczne zjawiska towarzyszące rozpuszczaniu w wodzie zanieczyszczeń, zwłaszcza organicznych</p>	<p>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej</p>
	<p>[K6_U05] potrafi wykorzystać do formułowania i rozwiązywania zadań inżynierskich metody analityczne, symulacyjne oraz eksperymentalne, potrafi zastosować wiedzę z podstaw fizyki i matematyki do analizy wyników eksperymentów, potrafi dokonać analiz i ocen istniejących rozwiązań technicznych</p> <p>can formulate and solve engineering tasks analytical methods, simulation as well as experimental, able to apply knowledge of basic physics and mathematics to analyze the results of experiments, is able to analyze and assess existing technical solutions</p>	<p>Student stosuje wiedzę z zakresu chemii fizycznej roztworów do przewidzenia zjawisk zachodzących w środowisku wodnym i używa praw fizykochemicznych w analizie i interpretacji wyników eksperymentów.</p>	<p>[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU1] Ocena realizacji zadania</p>
<p>Treści przedmiotu</p>	<p>WYKŁADY</p> <p>Wprowadzenie: niezbędna termodynamika. Teoria oddziaływań międzycząsteczkowych: rola gęstości elektronowej, oddziaływania niekowalencyjne a chemia kwantowa. Oddziaływania międzycząsteczkowe a rozkład ładunku: elektrostatyczne (ładunek-ładunek), dipolowe (ładunek-dipol, dipol-dipol, dipol indukowany-dipol), siły dyspersyjne Londona (dipol indukowany-dipol indukowany). Wiązanie wodorowe: definicja i właściwości, rodzaje wiązań wodorowych, siła wiązań wodorowych, wiązania wodorowe C-H, mostki solne. Badanie oddziaływań międzycząsteczkowych i hydratacji: spektroskopia, pomiary termofizyczne, chemia obliczeniowa. Właściwości wody: anomalie wody w stanie ciekłym, woda vs woda morska. Hydratacja niejonowa: hydratacja cząsteczek niejonowych, stabilizacja grup polarnych wiązaniami wodorowymi, termodynamika i właściwości roztworów nieelektrolitów. Hydratacja jonowa: kationy a aniony, aktywność jonowa, właściwości roztworów elektrolitów, termodynamika roztworów elektrolitów. Hydratacja hydrofobowa: termodynamika hydratacji hydrofobowej, struktura wody wokół cząstek hydrofobowych, klatraty, oddziaływania hydrofobowe, efekt hydrofobowy, skale hydrofobowości, superhydrofobowość. Hydratacja biocząsteczek: osmolyty, polielektrolity w wodzie, polimery rozpuszczalne w wodzie, hydratacja i związanie białek, hydratacja innych naturalnych polimerów, koloidy, woda "wewnętrzna".</p> <p>LABORATORIA</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Spektrofotometryczne oznaczanie stałej tworzenia kompleksów w roztworach wodnych 2. Wyznaczanie cząstkowych objętości molowych w układach woda-rozpuszczalnik organiczny 3. Zastosowanie spektroskopii w podczerwieni do badania hydratacji 		
<p>Wymagania wstępne i dodatkowe</p>	<p>Ukończony podstawowy kurs chemii fizycznej.</p>		

Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Końcowy test z materiału wykładów	50.0%	65.0%
	Sprawdziany i sprawozdania laboratoryjne	60.0%	35.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. P. Atkins, J. de Paula, J. Keeler. Atkins' physical chemistry. Oxford University Press, Oxford 2018. 2. B. E. Conway. Ionic hydration in chemistry and biophysics. Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam 1981. 3. A. Ben-Naim. Hydrophobic Interactions. Plenum Press, New York 1980.	
	Uzupełniająca lista lektur	1. L. Piela. Ideas of quantum chemistry. Elsevier, Amsterdam 2007. 2. A. Ben-Naim. Molecular theory of water and aqueous solutions. Pt. 1, Understanding water. World Scientific, Singapore 2009.	
	Adresy eZasobów	Podstawowe https://water.lsbu.ac.uk - M. Chaplin, Water Structure and Science https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Topics_in_Thermodynamics_of_Solutions_and_Liquid_Mixtures - M. J. Blandamer, J. C. R. Reis, Topics in Thermodynamics of Solutions and Liquid Mixtures Adresy na platformie eNauczenie: Hydration of molecules and intermolecular interactions 2023 - Moodle ID: 32060 https://enauczenie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=32060	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Opisz przydatność zredukowanego gradientu gęstości do wykrywania oddziaływań niekwalencyjnych. 2. Omów procedurę doświadczalną pozwalającą na otrzymanie absolutnej entalpii hydratacji protonu (H ⁺). 3. Opisz rodzaje oddziaływań zwanych zbiorczo siłami van der Waalsa i ich zależność od odległości. 4. Wymień skale hydrofobowości stosowane dla aminokwasów i ich podstawy fizyczne. 5. Co to są mostki solne i jaka jest ich rola w stabilizacji struktury białek? 6. Zdefiniuj osmolit. Omów różnicę między stabilizującymi i destabilizującymi osmolitami. 7. Pokaż skalę jonów kosmotropowych/chaotropowych i zdefiniuj pojęcie kosmo-/chaotropowości. 8. Jaki mechanizm termodynamiczny powoduje agregację cząstek hydrofobowych w wodzie? 9. Wymień czynniki decydujące o rozpuszczalności gazów w wodzie. 10. Zdefiniuj klatrat i omów znaczenie klatratów dla gospodarki i środowiska.		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		