



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	FIZYKA CHEMICZNA, PG_00048936						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2023/2024		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	1		Liczba punktów ECTS		4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		egzamin		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Aneta Panuszko				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr inż. Joanna Grabowska dr hab. Aneta Panuszko dr hab. inż. Piotr Bruździak dr hab. inż. Dorota Warmińska dr hab. inż. Joanna Krakowiak dr hab. inż. Jarosław Wawer				
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	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	60	10.0	30.0	100		
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studenta z różnymi technikami, zarówno eksperymentalnymi i teoretycznymi, stosowanymi do badania właściwości fizykochemicznych roztworów i układów złożonych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W05] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie fizyki, obejmującą zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędną do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania rozmaitych problemów technicznych w tym pracy z takimi urządzeniami jak mikroskopy elektronowe.	Student potrafi budować proste układy symulacyjne i przeprowadza ich symulacje metodami dynamiki molekularnej. Student dokonuje analizy rezultatów uzyskanych metodami dynamiki molekularnej i wyciąga na ich podstawie wnioski.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, również w języku angielskim, potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie,	umiejętność krytycznej oceny źródeł informacji dostępnych w literaturze	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU1] Ocena realizacji zadania
[K7_W02] ma uporządkowaną, poszerzoną wiedzę związaną ze współczesną chemią, obejmującą właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń i rozwiązywania problemów technicznych, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność	Student zna i rozumie zasadę działania aparatury pomiarowej stosowanej do badania właściwości fizykochemicznych roztworów i układów złożonych. Student opracowuje i interpretuje wyniki przeprowadzonych eksperymentów fizykochemicznych.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej	
Treści przedmiotu	<p>Tematyka przedmiotu porusza następujące zagadnienia:</p> <ol style="list-style-type: none"> Spektroskopia w podczerwieni w badaniu oddziaływań międzycząsteczkowych: metody opracowywania widm, wybrane metody chemometryczne w analizie serii widmowych w rozwiązywaniu problemów chemicznych. Analiza struktury i energii wiązań wodorowych wody wokół substancji rozpuszczonej: technika rozcieńczenia izotopowego, metoda widm różnicowych, parametry spektralne pasma OD, reguła Badger-Bauer'a, empiryczna funkcja korelująca odległość międzycząsteczkową tlen-tlen z położeniem pasma. Oddziaływania międzycząsteczkowe w roztworach elektrolitów zawierających rozpuszczalniki o zróżnicowanych właściwościach donorowych i budowie przestrzennej oraz w wodnych roztworach nieelektrolitów z wykorzystaniem precyzyjnych pomiarów gęstości oraz prędkości dźwięku: wyznaczanie granicznych wartości pozornych objętości i ściśliwości molowych, podział standardowych cząstkowych objętości oraz ściśliwości molowych elektrolitów na udziały jonowe, wyznaczanie liczb solwatacyjnych jonów w oparciu o ściśliwość adiabatyczną oraz standardową cząstkową objętość molową, współczynnik rozszerzalności cieplnej, zależność Heplera, standardowe cząstkowe objętości i ściśliwości molowe przeniesienia substancji rozpuszczonej, równanie McMillana i Mayera. Badanie procesu agregacji cząsteczek mikroskopią sił atomowych; charakterystyka roztworów koloidalnych zawierających agregaty makrocząsteczek lub nanocząsteczki metodą pomiaru dynamicznego rozpraszania światła. Heterogeniczne reakcje redoks - obliczanie absolutnej wartości standardowego potencjału elektrody wodorowej z wykorzystaniem cyklu termodynamicznego. Potencjał standardowy reakcji redukcji wyznaczanie, zastosowanie i korelacje z parametrami odzwierciedlającymi strukturę elektronową molekuly. Podstawy metod modelowania molekularnego: modele oddziaływań międzycząsteczkowych, uwzględnienie więzów; problem granic układów symulacyjnych, periodyczne warunki brzegowe; dynamika molekularna, numeryczne rozwiązywanie równań ruchu cząstek; różne warunki prowadzenia symulacji (NVT, NpT); metody analizy rezultatów: struktura cieczy, funkcje rozkładu radialnego, czasowe funkcje korelacji, dyfuzja. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka, Fizyka, Chemia Fizyczna		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	laboratorium komputerowe	60.0%	25.0%
	elementy praktyczne wykładu	60.0%	25.0%
	egzamin	60.0%	50.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. H. Mark, J. Workman, Jr. , "Chemometrics in spectroscopy", 2007, Elsevier 2. J. Stangret, <i>Zeszyty Naukowe Politechniki Gdańskiej</i>, Chemia XLV (578), 2000. 3. Z. Jia, J. Li, L. Gao, D. Yang, A. Kanaev, Dynamic Light Scattering: A Powerful Tool for In Situ Nanoparticle Sizing, <i>Colloids Interfaces</i> 7, (2023) 15 4. Malvern Instruments, technical note, "Dynamic Light Scattering: An Introduction in 30 Minutes" MRK656-01 5. S. Liu, Y. Wang, Application of AFM in Microbiology: A Review <i>Scanning</i> 32, (2010) 6173 6. <i>Organic Electrochemistry: Revised and Expanded</i> (pp.229-259), Edition: 5th, Chapter: 6, Publisher: CRC Press, Taylor and Francis Group, Editors: Ole Hammerich, Bernd Speiser 7. M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS Development Team. GROMACS 2023.4 Manual
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. M. Śmiechowski, J. Stangret, Vibrational spectroscopy of semiheavy water (hdo) as a probe of solute hydration, <i>Pure Appl. Chem.</i> 82 (10) (2010) 18691887. 2. M. Szklarczyk, <i>Mikroskopia chemiczna i analityczne techniki wielowymiarowe oraz sprzężone</i> PWN 2020
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> 1. W jakim celu stosuje się chemometryczne metody analizy w przypadku danych widmowych? 2. Na prostym przykładzie omów regułę Badger-Bauer'a. 3. Z jakich udziałów składa się standardowa cząstkowa objętość molowa elektrolitu? 4. Jak uzyskuje się funkcję korelacyjną w pomiarach DLS? 5. Przeprowadzenie symulacji komputerowej gazowego argonu w warunkach stałego ciśnienia i stałej objętości. 	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	