

## Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia fizyczna stosowana, PG_00066089						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
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			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. Aneta Panuszko					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Aneta Panuszko dr hab. inż. Piotr Bruździak dr inż. Joanna Grabowska dr hab. inż. Dorota Warمیńska dr hab. inż. Joanna Krakowiak					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	15.0	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		5.0		25.0	75
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_U04] opracowuje i przekazuje informacje techniczne w postaci dokumentów tekstowych, arkuszy kalkulacyjnych, wykresów, schematów technologicznych oraz prezentacji multimedialnych, oraz przygotowuje wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną	Student opracowuje oraz przekazuje raporty techniczne w formie dokumentów tekstowych oraz arkuszy kalkulacyjnych. Student tworzy wykresy i schematy do analizy wyników. Student opracowuje prezentację multimedialną i prezentuje wyniki w formie wystąpienia publicznego.	[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_W03] rozpoznaje i opisuje zjawiska z zakresu fizyki, obejmującą elementy mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędne do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania problemów technicznych	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.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U02] przygotowuje szczegółową dokumentację wyników realizacji samodzielnie prowadzonych eksperymentów oraz analizuje otrzymane wyniki, posługiwać się ze zrozumieniem fachowym słownictwem oraz przygotować i przekazywać informacje	Student opracowuje i interpretuje wyniki samodzielnie przeprowadzonych eksperymentów fizykochemicznych. Student przedstawia wyniki w formie sprawozdania.	[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania
[K7_K02] potrafi współdziałać i pracować w grupie, przyjmując w niej różne role	Student efektywnie współpracuje w zespole, przyjmując różne role, w celu realizacji wspólnych zadań i projektów. Student podejmuje odpowiedzialność za określone zadania, a także angażuje się w komunikację i rozwiązywanie problemów w grupie.	[SK4] Ocena umiejętności komunikacji, w tym poprawności językowej [SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce	
Treści przedmiotu	<p>Tematyka przedmiotu porusza następujące zagadnienia:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>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.</li> <li>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.</li> <li>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.</li> <li>Podstawy metod modelowania molekularnego: modele oddziaływań międzycząsteczkowych, uwzględnienie wiązań; 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.</li> </ol>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka, Fizyka, Chemia Fizyczna		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	sprawozdania (projekt)	60.0%	50.0%
	kolokwia + sprawozdania (laboratorium)	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>H. Mark, J. Workman, Jr., "Chemometrics in spectroscopy", 2007, Elsevier</li> <li>J. Stangret, <i>Zeszyty Naukowe Politechniki Gdańskiej</i>, Chemia XLV (578), 2000.</li> <li>Organic Electrochemistry: Revised and Expanded (pp.229-259), Edition: 5th, Chapter: 6, Publisher: CRC Press, Taylor and Francis Group, Editors: Ole Hammerich, Bernd Speiser</li> <li>M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS Development Team. GROMACS 2023.4 Manual</li> </ol>	

	Uzupełniająca lista lektur	1. M. Śmiechowski, J. Stangret, Vibrational spectroscopy of semiheavy water (hdo) as a probe of solute hydration, Pure Appl. Chem. 82 (10) (2010) 18691887.
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. W jakim celu stosuje się chemometryczne metody analizy w przypadku danych widmowych?</li> <li>2. Na prostym przykładzie omów regułę Badger-Bauer'a.</li> <li>3. Z jakich udziałów składa się standardowa cząstkowa objętość molowa elektrolitu?</li> <li>4. Przeprowadzenie symulacji komputerowej gazowego argonu w warunkach stałego ciśnienia i stałej objętości.</li> </ol>	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.