



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemia fizyczna stosowana, PG_00066089						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
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	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Aneta Panuszko				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	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 [K7_K02] potrafi współdziałać i pracować w grupie, przyjmując w niej różne role	Efekt z przedmiotu 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.	Sposób weryfikacji i oceny efektu [SK5] Assessment of ability to solve problems that arise in practice [SK1] Assessment of group work skills [SK4] Assessment of communication skills, including language correctness
	[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.	[SU1] Assessment of task fulfilment [SU4] Assessment of ability to use methods and tools [SU5] Assessment of ability to present the results of task
	[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 rozwiązywania 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.	[SW3] Assessment of knowledge contained in written work and projects [SW1] Assessment of factual knowledge
	[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.	[SU3] Assessment of ability to use knowledge gained from the subject [SU4] Assessment of ability to use methods and tools [SU5] Assessment of ability to present the results of task
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - laboratoria Tematyka przedmiotu porusza następujące zagadnienia: - 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 ściślności molowych, podział standardowych cząstkowych objętości oraz ściślności molowych elektrolitów na udziały jonowe, wyznaczanie liczb solwatacyjnych jonów w oparciu o ściślność adiabaticzną oraz standardową cząstkową objętość molową, współczynnik rozszerzalności cieplnej, zależność Heplera, standardowe cząstkowe objętości i ściślności molowe przeniesienia substancji rozpuszczonej, równanie McMillana i Mayera. - 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 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.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka, Fizyka, Chemia Fizyczna		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	kolokwia + sprawozdania (laboratorium)	60.0%	50.0%
	sprawozdania (projekt)	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	H. Mark, J. Workman, Jr., "Chemometrics in spectroscopy", 2007, Elsevier J. Stangret, <i>Zeszyty Naukowe Politechniki Gdańskiej</i>, Chemia XLV (578), 2000. - Organic Electrochemistry: Revised and Expanded (pp.229-259), Edition: 5th, Chapter: 6, Publisher: CRC Press, Taylor and Francis Group, Editors: Ole Hammerich, Bernd Speiser - M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS Development Team. GROMACS 2023.4 Manual	

	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	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	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. Przeprowadzenie symulacji komputerowej gazowego argonu w warunkach stałego ciśnienia i stałej objętości.	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.