

## PODZIAŁ MERYTORYCZNY TREŚCI PRZEDMIOTÓW KIERUNKOWYCH

### 1. Podstawy

#### **Chemia ogólna (I, II)**

Chemia we współczesnym świecie. Pochodzenie pierwiastków. Budowa atomu i struktura elektronowa atomu wieloelektronowego. Cząsteczka, rodzaje wiązań, oddziaływania międzycząsteczkowe. Układ okresowy i właściwości okresowe pierwiastków wieloelektronowych. Faza gazowa, ciekła i stała - ich podstawowe właściwości. Wodór i woda (wybrane zagadnienia ekologiczne). Pierwiastki alkaliczne i helowce jako przeciwstawne grupy. Rodzaje reakcji chemicznych. Kinetyka i termodynamika. Równowaga chemiczna, roztwory, elektrolity. Równowagi kwasowo-zasadowe, pH. Fluorowce, tlenowce i azotowce. Węglowce, borowce i berylowce. Procesy utlenienia i redukcji. Elementy elektrochemii. Ogólna charakterystyka pierwiastków przejściowych.

Narodziny nowoczesnej chemii i fizyki. Efekt fotoelektryczny, efekt Comptona, widma atomowe, promieniowanie ciała doskonale czarnego. Falowe i korpuskularne własności materii. Hipoteza Plancka, relacja de Broglie'a. Fotony i elektrony – cząstki czy fale? Opis materii za pomocą równania falowego. Sens fizyczny funkcji falowej. Atom wodoru. Pojęcie orbitalu, jego kształt i energia. Sens liczb kwantowych. Powłoki, podpowłoki. Cząsteczki. Klasyfikacja. Rozmiary i ich wyznaczanie. Natura wiązania chemicznego. Rząd wiązania. Wiązania kowalencyjne i jonowe. Elektroujemność. Elementarne podstawy spektroskopii i jej rola w chemii. Rodzaje spektroskopii. Zastosowania strukturalne, analityczne, w ochronie środowiska i medycynie. Symetria i jej wykorzystanie w chemii. Moment dipolowy. Moment przejścia.

Nowoczesne gałęzie chemii. Chemia supramolekularna. Femtochemia. Chemia pojedynczych cząsteczek.

#### **Podstawy elektrochemii**

Fenomenologiczny i teoretyczny opis właściwości roztworów elektrolitów, przewodnictwo. Granica faz elektroda/roztwór. Elektrody polaryzowalne i niepolaryzowalne. Potencjał elektryczny na granicy faz elektroda/roztwór. Korelacja pomiędzy potencjałem elektrycznym a pracą wyjścia elektronu. Potencjał zerowego ładunku. Termodynamika i kinetyka procesów elektrochemicznych: samorzutnych (ogniwa) i wymuszonych (elektroliza). Różnica potencjałów elektrod ogniwa i jej związki z wielkościami charakteryzującymi procesy elektrodowe. Adsorpcja na granicy faz elektroda/roztwór. Podstawowe elektrody. Potencjały elektrod - zależność od stężenia i temperatury. Opis teoretyczny granicy faz elektroda/roztwór (modele molekularne, metody symulacyjne). Konwersja i akumulacja energii elektrycznej. Korozja. Elektroanaliza. Elektrochemiczne źródła energii (baterie słoneczne, ogniwa paliwowe).

#### **Pracownia chemii ogólnej**

Zasady bezpieczeństwa pracy w laboratorium chemicznym. Podstawowe czynności laboratoryjne i organizacja pracy w laboratorium. Reakcje w roztworach wodnych. Reakcje utleniania i redukcji metali. Oczyszczanie substancji. Krystalizacja. Sublimacja. Rozdzielanie barwników roślinnych metodami chromatograficznymi. Synteza kwasu wolframianokrzemowego  $H_8[Si(W_2O_7)_6] \cdot x H_2O$ . Ogniwo elektrochemiczne, zastosowanie odwracalnych ogniw galwanicznych do wyznaczania wielkości termodynamicznych.

## **Chemia nieorganiczna**

Klasyfikacja związków nieorganicznych. Wiązania chemiczne a struktura cząsteczek. Reaktywność związków nieorganicznych. Elementy chemii ciała stałego. Przegląd podstawowych grup pierwiastków: wodór, litowce, berylowce, borowce, węglowce, azotowce, tlenowce, fluorowce, helowce. Związki metaloorganiczne pierwiastków bloku s i p. Pierwiastki przejściowe. Budowa i właściwości związków metali przejściowych. Elementarne zagadnienia związków kompleksowych i ich reaktywności. Widma elektronowe związków kompleksowych. Podstawy katalizy homogenicznej. Pierwiastki bloku d. Związki metaloorganiczne pierwiastków bloku d. Pierwiastki bloku f. Elementy chemii bionieorganicznej.

## **Chemia fizyczna (I, II)**

Podstawowe pojęcia i definicje (stan równowagi i podstawowy postulat termodynamiki, zerowa zasada termodynamiki, temperatura i ciśnienie oraz sposoby ich pomiaru). I zasada termodynamiki, energia wewnętrzna, zmiana energii wewnętrznej w procesach parowania, reakcji chemicznych, pracy w procesie izotermicznym i izobarycznym, pojemność cieplna, energia wewnętrzna gazu doskonałego. II zasada termodynamiki, maksimum entropii w układzie izolowanym, entropia a przekaz ciepła, silniki cieplne, cykl Carnot, temperatura bezwzględna, wzrost entropii w procesach samorzutnych, entropia gazu doskonałego. Procesy spontaniczne a potencjały termodynamiczne (od układu + otoczenie do samego układu), energia swobodna Helmholtza, energia swobodna Gibbsa, potencjał termodynamiczny, entalpia, wielki potencjał termodynamiczny, związek potencjałów termodynamicznych z ciepłem i praca, relacje Maxwella, podatności termodynamiczne, równanie Gibbsa-Duhema. Zastosowania termodynamiki: przejścia fazowe, diagramy fazowe, warunek równowagi faz, równanie Clapeyrona, punkt potrójny i punkt krytyczny, równanie stanu van der Waalsa, stany skupienia i fazy ciekłokrystaliczne. Zastosowanie termodynamiki: mieszaniny, prawo Raoult'a, prawo Henry'ego, reguła faz Gibbsa, roztwory doskonałe, ciśnienie osmotyczne, podwyższanie temperatury wrzenia i obniżanie temperatury krzepnięcia, eutektyki, rozpuszczalność gazu w cieczy, roztwory rzeczywiste, lotność, stany standardowe. Zastosowania termodynamiki: reakcje chemiczne, warunek równowagi chemicznej, reguła Le Chateliera, prawo działania mas, prawo Hessa, praca reakcji, potencjał elektrochemiczny a pomiar potencjału chemicznego, ogniwo galwaniczne, napięcie ogniwa, równanie Nernsta. Elementy termodynamiki statystycznej jako element opisu komplementarnego do termodynamiki fenomenologicznej: prawdopodobieństwo, mikrostan i makrostan, zespoły statystyczne.

Rodzaje kryształów z punktu widzenia istniejących w nich wiązań. Struktury najgęstszej upakowania atomów w sieci przestrzennej. Kryształy jonowe: założenia modelu kryształu jonowego, korelacja między liczbą ligandów i promieniem jonowym; podstawowe struktury związków jonowych; entalpia sieciowa, cykl Born'a-Habera. Struktury krzemianów. Model pasmowy ciała stałego a przewodnictwo elektryczne. Rodzaje półprzewodników. Odpowiedź układu gazowego będącego w stanie równowagi reakcji chemicznej na zmianę temperatury i ciśnienia. Równanie van't Hoff'a. Podstawowe pojęcia kinetyki chemicznej: szybkość reakcji, równanie kinetyczne, rzędowość i cząsteczkowość. Przybliżenie stanu stacjonarnego w kinetyce chemicznej. Mechanizm reakcji enzymatycznych (Michaelisa-Menten). Reakcje łańcuchowe, omówienie ogólne z podaniem typów etapów elementarnych oraz ewentualnego wpływu na kształt ostatecznego równania kinetycznego. Zależność szybkości reakcji od temperatury. Równanie Arrheniusa. Interpretacja energii aktywacji w oparciu o teorię zderzeń lub teorię kompleksu aktywnego. Zjawiska adsorpcji. Rodzaje adsorpcji. Równanie izoterm adsorpcji Langmuira. Kataliza. Istota katalizy. Rodzaje reakcji katalitycznych, przykłady zastosowania katalizy w przemyśle. Działanie (reakcje elektrodowe) akumulatora ołowiowego.

Działanie (reakcje elektrodowe) suchego ogniwa (Leclanchégo). Znaczenie ATP dla funkcjonowania organizmów żywych

### **Pracownia chemii fizycznej I**

Korozja metali (mikrostruktura metali a procesy korozyjne, określenie skutków korozji metalu w agresywnym środowisku, ocena prawdopodobieństwa korozji na podstawie diagramów potencjał-pH).

Elektroliza, wyznaczenie stałej Faradaya.

Kinetyka zaniku tlenu atmosferycznego w zanieczyszczonych wodach naturalnych.

Izotermy adsorpcji, adsorpcja błękitu metylenowego na węglu aktywnym.

### **Podstawy katalizy chemicznej**

Zjawisko katalizy – podstawowe definicje i pojęcia, rodzaje katalizy. Znaczenie katalizy w przemyśle chemicznym. Istota działania katalizatora. Podstawowe problemy katalizy heterogenicznej. Etapy elementarne procesów katalitycznych. Omówienie niektórych przemysłowych procesów katalitycznych: katalizatory, układy technologiczne, znaczenie (np. hydorafinacja w przemyśle petrochemicznym, izomeryzacja parafin, propylen izotaktyczny, katalizatory do kontroli składu spalin samochodowych, tlenek etylenu, hydroformylowanie propylenu, synteza metanolu, bezwodnik maleinowy, MTBE, kaprolaktam, ibuprofen, itp.). Kinetyka reakcji katalitycznych (równanie kinetyczne, przybliżenia: rds - quasi-równowaga). Rola adsorpcji w katalizie heterogenicznej. Preparatyka katalizatorów – metody. Metody charakterystyki katalizatorów i określania mechanizmu reakcji. Metody określania aktywności katalitycznej. Dezaktywacja i regeneracja katalizatorów. Mechanizmy wybranych reakcji katalitycznych.

### **Chemia organiczna (I, II)**

Wprowadzenie do chemii organicznej, rys historyczny. Hybrydyzacja pierwiastków i rodzaje wiązań występujących w związkach organicznych. Alkany, alkeny, alkiny, dieny, i związki aromatyczne. Nazewnictwo IUPAC. Elementy analizy konformacyjnej. Właściwości kwasowo-zasadowe związków organicznych. Elektroujemność i polaryzowalność związków organicznych. Przemiany połączeń organicznych. Karbokationy, karboaniony, karbeny i wolne rodniki - budowa i właściwości. Izomeria geometryczna i strukturalna. Addycja do wiązań wielokrotnych. Addycja elektrofilowa do alkenów. Substytucja elektrofilowa i nukleofilowa w układach aromatycznych - wpływ skierowujący podstawników. Izomeria wielopodstawionych związków aromatycznych. Substytucja nukleofilowa  $S_N1$  i  $S_N2$ . Reakcje eliminacji E1 i E2. Reakcje przegrupowania, izomeryzacji, dehydratacji, utleniania i redukcji. Stereochemia. Chiralność - reguły nazewnictwa R/S. Enancjomery, diastereoizomery, związki mezo. Synteza, budowa, własności i typowe reakcje: węglowodorów alifatycznych i aromatycznych, związków halogenoorganicznych, alkoholi, fenoli, eterów, aldehydów, ketonów, kwasów karboksylowych i ich pochodnych, amin alifatycznych i aromatycznych. Zastosowania spektroskopii elektronowej, oscylacyjnej i Ramana, magnetycznego rezonansu jądrowego oraz spektroskopii mas w chemii organicznej.

### **Pracownia chemii organicznej I**

Zasady bezpieczeństwa pracy w laboratorium chemii organicznej. Zapoznanie z podstawowymi czynnościami laboratoryjnymi na przykładzie syntez: acetanilidu, nitrowania acetanilidu, octanu butylu, redukcji p-nitrotoluenu i kwasu o-jodobenzoowego lub aspiryny.

### **Podstawy chemii analitycznej**

Zakres, rola i miejsce chemii analitycznej w naukach przyrodniczych. Analiza próbek rzeczywistych (pobieranie i przygotowywanie próbek do analizy: rozpuszczanie i/lub rozkład; eliminowanie zanieczyszczeń). Błędy w analizie chemicznej: pochodzenie, sposoby usuwania i ocena statystyczna. Podstawy analizy jakościowej - rozdzielanie i oznaczanie kationów i anionów w roztworach: reakcje wytrącania, kompleksowania oraz utleniania i redukcji. Analiza ilościowa kationów i anionów w roztworach: oznaczanie metodami grawimetrycznymi (argentometria), oznaczanie metodami wolumetrycznymi: zobojętnianie (acydymetria i alkalimetria, wskaźniki kwasowości), kompleksowanie (kompleksometria), miareczkowanie redoks (manganometria, jodometria). Podstawowe metody rozdzielania: strącanie, ekstrakcja, wymiana jonowa, chromatografia. Analiza substancji gazowych.

### **Pracownia chemii analitycznej**

Podstawy analizy jakościowej. Charakterystyczne reakcje jonów (reakcje strącania osadów, kwasy i zasady oraz związki kompleksowe i reakcje redoks w analizie chemicznej). Analiza wody.

Podstawy analizy ilościowej. Analiza błęd. Miareczkowanie kwasowo-zasadowe. Analiza objętościowa (alkacymetria, miareczkowanie kompleksometryczne, miareczkowanie redoks). Zastosowanie spektrofotometrii absorpcyjnej UV-vis w analizie ilościowej.

### **Podstawy technologii chemicznej (I,II)**

Fizykochemiczne podstawy operacji technologicznych. Zasady technologiczne. Operacje i procesy jednostkowe. Kataliza i katalizatory w technologii. Reaktory chemiczne. Odczytywanie schematów technologicznych. Podstawowe obliczenia w technologii (bilanse). Podstawowe surowce przemysłu chemicznego - możliwości wykorzystania. Przegląd ważniejszych technologii chemicznych. Technologie nowych materiałów. Zagospodarowanie i utylizacja odpadów stałych oraz ścieków. Technologie bezodpadowe - recykling.

## 2. Mechanizmy

### Chemia kwantowa

Geneza i podstawy; eksperymentalne dowody korpuskularno-falowego charakteru materii. Różnice pomiędzy mechaniką klasyczną i kwantową. Najważniejsze daty i wydarzenia w mechanice kwantowej. Klasyczne równanie falowe. Równanie Schrödingera. Operatory. Postulaty mechaniki kwantowej. Modele chemii kwantowej. Cząstka swobodna i cząstka w pudle jedno, dwu i trójwymiarowym. Zastosowania do opisu widm elektronowych. Zasada nieoznaczoności. Sztywny rotator. Oscylator harmoniczny. Ujęcia kwantowe i klasyczne. Atom wodoru. Rozwiązanie równania Schrödingera. Orbitale wodoropodobne. Metody przybliżone. Rachunek zaburzeń i metoda wariacyjna. Zastosowanie do atomu helu. Atomy wieloelektronowe. Orbitale, konfiguracje, zasada Pauliego, reguły Hunda. Termy atomowe. Dokładna analiza orbitali atomowych: kształt, sens liczb kwantowych, wartości średnie, najbardziej prawdopodobne. Definiowanie rozmiarów atomu. Cząsteczki dwuatomowe – homo i heterojądrowe. Metoda orbitali molekularnych. Orbitale typu  $\sigma$  i  $\pi$ . Konfiguracje elektronowe. Termy molekularne. Spektroskopia fotoelektronowa. Twierdzenia Koopmansa. Granica Hartree-Focka. Cząsteczki wieloatomowe. Orbitale molekularne. Rola symetrii w konstruowaniu orbitali. Przykłady orbitali molekuł aromatycznych i kompleksów. Wnioski płynące z analizy orbitali molekularnych. Optymalizacja geometrii, minima globalne i lokalne, stany przejściowe.

### Chemia organiczna III

Powtórzenie i rozszerzenie materiału z budowy związków organicznych (struktura elektronowa i geometria, wiązania i siły wewnątrzcząsteczkowe, aromatyczność). Struktura a reaktywność związków organicznych. Reakcje związków organicznych i ich mechanizmy: alifatyczne podstawienie nukleofilowe, alifatyczne podstawienie elektrofilowe, aromatyczne podstawienie nukleofilowe, aromatyczne podstawienie elektrofilowe, podstawienie wolnorodnikowe, przyłączenie do wiązań wielokrotnych węgiel-węgiel, przyłączenie do wiązań wielokrotnych węgiel-heteroatom, reakcje eliminacji, przegrupowania, reakcje utleniania-redukcji. Wielofunkcyjne związki organiczne: monosacharydy, disacharydy i polisacharydy oraz hydroksykwasy, aminokwas i peptydy - synteza, budowa, właściwości. Wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne i związki heterocykliczne budowa, reakcje i właściwości. Elementy racjonalnej syntezy organicznej.

### Pracownia chemii organicznej II

Opanowanie ważniejszych metod syntezy w aspekcie 6 różnych ćwiczeń z preparatyki organicznej takich jak: reakcje podstawienia i wymiany (synteza chlorowcopochodnych z alkoholi lub węglowodorów), reakcje podstawienia (alkilowanie związków organicznych), reakcje kondensacji związków organicznych, reakcje eliminacji lub przyłączenia, reakcje utlenienia-redukcji, reakcje przegrupowania związków organicznych. Samodzielne wykonanie 2-4 etapowej syntezy jednego związku (przeszukiwanie literatury chemicznej, analiza sposobu wykonania syntezy, wykonanie syntezy, identyfikacja związku). Zaznajomienie się ze sposobami neutralizacji odpadów chemicznych.

### Fotochemia i spektroskopia

Ogólne podstawy spektroskopii. Stany wzbudzone, moment przejścia, reguły wyboru. Elementy technik spektralnych, lasery. Podstawy teoretyczne i eksperymentalne spektroskopii rotacyjnej. Reguły wyboru. Wnioski z widm. Zastosowania. Cząsteczki z przestrzeni międzygwiazdnej. Podstawy teoretyczne i eksperymentalne spektroskopii oscylacyjnej. Reguły wyboru. Wnioski z widm. Anharmoniczność. Częstości

charakterystyczne. Spektroskopia ramanowska. Analogie i różnice w stosunku do spektroskopii IR. Reguły wyboru. Zastosowania. Spektroskopia elektronowa. Reguła Francka-Condon. Typy przejść spektroskopowych. Reguły wyboru – rola symetrii. Widma oscylacyjno-rotacyjne i elektronowo-oscylacyjne. Elementy fotofizyki. Diagram Jabłońskiego. Depopulacja promienista i bezpromienista. Fluorescencja i fosforescencja. Wydajności kwantowe i czasy życia. Przenoszenie energii. Wygaszanie fluorescencji. Fotoindukowane procesy w stanach wzbudzonych: przenoszenie protonu, elektronu, fotoizomeryzacja. Spektroskopie NMR i EPR. Podstawy teoretyczne i metodyki pomiaru. Zastosowania. Elementy spektroskopii w świetle spolaryzowanym. Dichroizm kołowy i liniowy, anizotropia emisji. Zastosowania spektroskopii w analizie, ochronie zdrowia i środowiska. Elementy fotobiologii i fotomedycyny. Fototerapia.

**Projekty:** Analiza widma oscylacyjnego chlorowanych węglowodorów. Symetria molekuł a widma oscylacyjne. Widma absorpcji elektronowej. Widma luminescencji. Wydajność kwantowa i czas zaniku fluorescencji. Aktynometria, pomiar intensywności promieniowania.

### **Wstęp do teorii przejść fazowych**

Przypomnienie pojęcia fazy w termodynamice. Przykłady przejść fazowych. Przypomnienie współistnienia faz, pojęcia potencjału chemicznego i napięcia powierzchniowego. Równanie stanu gazu doskonałego i równanie stanu van der Waalsa. Punkt krytyczny, punkt potrójny, chłodzenie cieczy. Parowanie cieczy: rozkład temperatur, gęstości, entropii, produkcji entropii, potencjału chemicznego i ciśnienia w trakcie parowania otrzymany z równań nierównowagowej termodynamiki. Spinodala, krzywa współistnienia, uniwersalność zjawisk w punkcie krytycznym, długość korelacji i funkcja korelacji, metastabilność i niestabilność układów jednorodnych. Zjawisko nukleacji i rozpadu spinoidalnego. Kinetyka przejść fazowych – prawo wzrostu obszarów jednej fazy w drugiej. Teoria przejść fazowych według Landaua – parametr uporządkowania. Przejścia fazowe w mieszaninach podwójnych – model Flory-Hugginsa. Obserwacja kinetyki przejść fazowych na przykładzie mieszanin polimerów oraz mieszanin wody i surfaktantów (opis eksperymentów). Przejścia fazowe w ciekłych kryształach. Szkło i przejście w stan zeszklenia. Przejścia fazowe paramagnetyk-ferromagnetyk. Opis technik eksperymentalnych służących do badania przejść fazowych: rozpraszanie światła, rozpraszanie neutronów, kalorymetria, mikroskopia optyczna, rozpraszanie promieni Rentgena. Morfologiczna analiza struktur otrzymywanych w trakcie separacji faz.

### **Termodynamika i dynamika procesów nieodwracalnych**

Przypomnienie termodynamiki, zasady minimum potencjałów termodynamicznych, układy z więzami i bez więzów. Przypomnienie podstaw mechaniki statystycznej, zespoły, prawdopodobieństwa, mikrostany i makrostany. Teoria fluktuacji w termodynamice według Einsteina. Ogólna teoria fluktuacji zmiennych termodynamicznych. Teoria ruchów Browna, zjawiska transportu w organizmach żywych, molekularne motorki. Klasyczna termodynamika procesów nieodwracalnych, równania na zmienne termodynamiczne, prąd i produkcja entropii, zasada minimalizacji produkcji entropii w stanach stacjonarnych, efekty krzyżowe, zasada Curie, zasada Onsagera, reakcje chemiczne daleko i blisko stanu równowagi, reakcje oscylacyjne. Co to jest chaos? Wyjaśnienie dróg prowadzących do chaosu, układy daleko od stanu równowagi. Czy termodynamikę można stosować do organizmów żywych? Wprowadzenie elementów termodynamiki nieekstensywnej.

### 3. Nowoczesne materiały i ich fizykochemia

#### Chemia supramolekularna

Podstawowe zagadnienia i pojęcia. Receptory molekularne i substraty. Oddziaływania międzycząsteczkowe receptor-substrat. Stereochemia dynamiczna receptorów molekularnych i kompleksów inkluzyjnych. Rozpoznanie molekularne. Rodzaje samoorganizacji supramolekularnej: kowalencyjna, w oparciu o wiązania jonowe i koordynacyjne, w oparciu o oddziaływania „charge-transfer”, van der Waalsa,  $\pi$ - $\pi$ , samoorganizacja w hybrydowych sieciach organiczno-nieorganicznych. Samoorganizacja na powierzchniach: filmy Langmuira-Blodgett (multiwarstwy), micle, pęcherzyki (vesicles), samoorganizujące się monowarstwy na powierzchniach stałych. Aspekty nieorganiczne: poliokso-metalaty, heteropolianiony. Perspektywy chemii supramolekularnej.

#### Chemia związków kompleksowych

Budowa związków kompleksowych, figury koordynacyjne, haptyczność, chiralność, izomeria. Wiązania w kompleksach koordynacyjnych, ujęcie w teorii pola krystalicznego i teorii wiązań molekularnych. Własności magnetyczne i spektralne kompleksów koordynacyjnych – podstawy opisu w ramach wyżej wymienionych teorii. Ciepła tworzenia kompleksów. Rola wiązań  $\pi$  w kompleksach.

Reaktywność kompleksów koordynacyjnych: podstawowe mechanizmy reakcji wymiany ligandów, procesy redoks. Właściwości kompleksów na przykładzie szeregu pierwiastków przejściowych z okresu IV. Porównanie ze związkami metaloorganicznymi, podstawowe definicje, podobieństwa i różnice.

Wiązania międzymetaliczne w kompleksach, klastery.

Kompleksy koordynacyjne jako składniki struktur biologicznych: magazynowanie i transport tlenu, reakcje redoks, enzymy i cykle procesów katalitycznych. Rola związków kompleksowych w przyrodzie.

#### Fizykochemia materiałów (I, II)

Chemia ciała stałego. Metale i stopy, związki międzymetaliczne. Podstawowe koncepcje teorii pasmowej. Węgiel i inne materiały funkcjonalne. Materiały ceramiczne, krzemiany i glinokrzemiany. Struktura krystaliczna metali i jej defekty. Struktura cieczy, szkła metaliczne. Struktura realna metali i stopów. Roztwory stałe, fazy międzymetaliczne, wodorki. Wykresy równowag fazowych ważnych układów (Fe-C, stopów Al, Cu i Ti). Procesy korozyjne. Termodynamiczne i kinetyczne aspekty korozji. Rodzaje korozji. Korozja elektrochemiczna (równomierna, galwaniczna, wżerowa, międzykrystaliczna, selektywna). Metody badań i pomiarów korozyjnych. Korozja wspomagana naprężeniami mechanicznymi (korozja zmęczeniowa, fretting, korozja wodorowa). Korozja chemiczna, wysokotemperaturowa. Inne typy korozji (mikrobiologiczna, w ciekłych metalach, korozja tworzyw sztucznych i betonów). Inhibitory korozji. Wysokoenergetyczna modyfikacja powierzchni (laserowa, plazmowa, jonowa, wybuchowa) w mikro i nano skali.

#### Fizykochemia polimerów

Definicja i struktura chemiczna polimeru. Metody eksperymentalne wyznaczania masy polimeru. Reakcje polimeryzacji. Skale długości, czasu, energii i masy w odniesieniu do polimerów. Opis polimeru w oparciu o mechanikę statystyczną (opis Flory'ego). Konformacje polimeru, promień żyracji, promień hydrodynamiczny. Wyznaczanie promienia żyracji i hydrodynamicznego za pomocą rozpraszania światła. Rozmiary polimeru w roztworach, w mieszaninach z innymi polimerami, na ściankach (szczotki polimerowe). Roztwory polimerów i teoria Flory-Hugginsa, punkt theta i kolaps polimeru, biopolimery w

roztworach, zwijanie się białek, DNA w roztworach. Blokowe kopolimery, ciekłokrystaliczne polimery, przejścia fazowe, szkło polimerowe, krystalizacja polimerów. Własności dynamiczne i lepko-sprężyste polimerów. Ważniejsze klasy biopolimerów i polimerów używanych w przemyśle i metody ich syntezy. Metoda uzyskiwania dużej ilości materiału genetycznego (Polymerase Chain Reaction, PCR). Zwijanie się białek i ich struktura przestrzenna (od liniowej struktury chemicznej do przestrzennej struktury białek i ich funkcji biologicznej – problem drugiego kodu genetycznego). Helisy jako motyw strukturalny biomolekuł. Zastosowania polimerów dziś i jutro.

### **Fizykochemia powierzchni**

Rola badań powierzchni we współczesnej technologii. Definicja powierzchni: układy wyidealizowane, krystalografia powierzchni, napyłane warstwy, obiekty realne, szorstkość. Zagadnienia techniki próżni (wytwarzanie i pomiar próżni). Typowe zespoły aparaturowe. Adsorpcja gazów. Skład powierzchni ciał stałych – segregacja składników na powierzchnię, dynamiczne wzbogacanie powierzchni. Wybrane metody spektroskopowe badań powierzchni: spektroskopia elektronów Augera (AES), spektroskopia fotoelektronów (XPS), spektroskopia jonów wtórnych (SIMS). Wstęp do analizy ilościowej powierzchni.

### **Reaktywność metastabilnych stopów metalicznych**

Wprowadzenie -struktura i właściwości materiałów amorficznych. Reaktywność w środowiskach agresywnych: korozja i pasywacja. Aktywność katalityczna i modyfikacja aktywności metodami chemicznymi. Wybrane metody badania powierzchni i ich zastosowanie do badania modyfikowanych stopów amorficznych. Mikroanaliza rentgenowska i elektronów Augera - badania lokalnego składu chemicznego. Nanomateriały metaliczne, charakterystyka i właściwości. Właściwości katalityczne nanomateriałów.



#### 4. Nowoczesne metody i ich zastosowania

##### **Krystalografia**

Symetria cząsteczki a symetria w kryształach. Kryształ jako faza uporządkowana. Pojęcie komórki elementarnej, rodzaje komórek. Teoria sieciowa budowy kryształów, symetria punktowa, symetria sieci, grupy przestrzenne. Dyfrakcyjne metody badania struktury (prawo Bragga, rentgenografia, elektronografia, neutronografia). Niedoskonałości budowy kryształów, defekty punktowe, dyslokacje, defekty planarne. Krystalochemia. Klasyfikacja struktur krystalicznych ze względu na oddziaływania (metaliczne, jonowe, kowalencyjne, dyspersyjne, tworzące wiązania wodorowe), elementy krystalochemii makromolekuł.

##### **Pracownia chemii fizycznej (II,III)**

Wyznaczanie struktury kryształu i molekuly.

Zastosowanie rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronów do badania właściwości powierzchniowych ciał stałych.

Identyfikacja faz ciekłokrystalicznych na podstawie obserwacji tekstur.

Kataliza heterogeniczna z zastosowaniem układu metal-nośnik. Katalityczne selektywne uwodornienie heksynu-1 do heksenu-1.

Analiza termiczna. Różnicowa kalorymetria skaningowa.

Oscylacje stężeń reagentów i fale chemiczne w reakcji Bielousowa-Żabotyńskiego.

Wyznaczanie stałej szybkości metodą wygaszania fluorescencji.

Chemia stanów elektronowo wzbudzonych na przykładzie równowag kwasowo-zasadowych.

Analiza struktury rotacyjnej przejść oscylacyjnych CO<sub>2</sub>.

Widmo EPR wolnego rodnika a jego struktura.

Budowa i działanie lasera barwnikowego.

##### **Identyfikacja związków organicznych**

Wstęp - dawne metody identyfikacji związków organicznych i analiza elementarna. Ogólna klasyfikacja metod spektroskopowych. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR). Rezonans protonowy <sup>1</sup>H, węglowy <sup>13</sup>C i podstawowe informacje o rezonansie innych jąder (<sup>14</sup>N, <sup>15</sup>N, <sup>17</sup>O, <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P). Techniki NMR – podstawowe techniki jedno- i dwuwymiarowe. Podstawowe informacje o metodach rentgenograficznych. Spektrografia masowa. Spektroskopia oscylacyjna (IR), elektronowa (UV, VIS) oraz elektronowego rezonansu paramagnetycznego (EPR).

##### **Ćwiczenia:**

Obliczanie składu procentowego pierwiastków w związku organicznym; odtwarzanie wzoru sumarycznego związku na podstawie analizy elementarnej. Zastosowanie widm magnetycznego rezonansu jądrowego do ustalenia struktury związku (<sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, techniki specjalne i dwuwymiarowe). Przewidywanie widma NMR na podstawie struktury związku. Praktyczne zastosowanie widm IR, UV/VIS, EPR i widm masowych.

##### **Instrumentalne metody analizy chemicznej**

Charakterystyka sygnału analitycznego: czułość i wykrywalność, liniowość, szum, powtarzalność, precyzja i dokładność, specyficzność i selektywność, czas odpowiedzi. Metody wykrywania i oznaczania: elektrochemiczne (potencjometria i pH-metria, elektrody jonoselektywne, konduktometria i metody zmiennoprądowe; amperometria i kulometria, miareczkowanie kulometryczne; woltamperometria, woltamperometria z równoczesną mikrogravimetrią piezoelektryczną; miareczkowanie z potencjometryczną, konduktometryczną i amperometryczną detekcją punktu końcowego; biosensory elektrochemiczne), spektralne (oparte o widma atomowe: atomowa spektroskopia emisyjna,

fotometria płomieniowa, spektrografia i spektrometria emisyjna, fluorescencyjna i absorpcyjna spektrometria atomowa; oparte o widma cząsteczkowe: spektrofotometria absorpcyjna cząsteczkowa w świetle widzialnym i nadfioletowym, spektrometria fluorescencyjna cząsteczkowa, tj. fluorymetria i fosforymetria; spektroskopia nadźwiękowych wiązek molekularnych), optyczne (turbidymetria, interferometria, polarymetria, refraktometria, nefelometria), termochemiczne (termograwimetria, termiczna analiza różnicowa, kriometria i ebuliometria, miareczkowanie kalorymetryczne), radiochemiczne (analiza aktywacyjna, rozcieńczenie izotopowe, analiza radiometryczna). Metody zagęszczania i rozdzielania: wstrzykowa analiza przepływowa, chromatografia (chromatografia gazowa, wysokosprawna chromatografia cieczowa, chromatografia w stanie nadkrytycznym, chromatografia cienkowarstwowa), wysokosprawna elektroforeza kapilarna, ekstrakcja i wymiana jonowa.

### **Pracownia analizy instrumentalnej (I,II)**

Chromatografia gazowa ze spektrometrią mas – nowoczesna metoda szybkiej analizy mieszanin związków organicznych. Rozdzielanie enancjomerów metodami chromatografii cieczowej i gazowej. Zastosowanie cyklodekstryn do rozdzielania enancjomerów kwasu ftalowego i ich oznaczania za pomocą micelarnej chromatografii elektrokinetycznej (MEKC). Rozdzielanie mieszaniny jonów o różnej gęstości ładunku i ich oznaczanie za pomocą strefowej elektroforezy kapilarnej (CZE).

Oznaczanie jonów metali metodą polarograficzną i woltamperometryczną. Zastosowanie woltamperometrii cyklicznej do badania reakcji kompleksowania.

Fluorescencyjna analiza rentgenowska.

Analiza składu próbki techniką spektroskopii elektronów Augera. Zastosowanie spektroskopii AES do badania, ex-situ, głębokościowych profili składu warstw pasywnych tworzących się na szklach metalicznych Al-metale ciężkie.

### **Niekonwencjonalne metody syntezy nieorganicznej**

Metody wytwarzania materiałów z pomocą procesów, zachodzących w szczególnych warunkach; np. przy wysokich ciśnieniach (również w fazach gazowych), w warunkach szybkiego schłodzenia, w procesach napyłania i in. Własności materiałów otrzymywanych w tych procesach (materiały monokrystaliczne, amorficzne i nanomateriały). Aparatura stosowana w takich procesach. Metody otrzymywania monokryształów kwarcu, diamentu (metody wysoko- i niskociśnieniowe), azotku boru i innych materiałów monokrystalicznych; wysokociśnieniowe syntezy azotków i wodorków (wodorki niklu, żelaza, manganu i innych metali przejściowych); syntezy nowych wodorków w związkach międzymetalicznych, w szczególności w fazach Lavesa. Metody otrzymywania termodynamicznie niestabilnych „szkieł metalicznych” (metoda otrzymywania jednorodnych materiałów o składzie chemicznym niemożliwym do uzyskania w warunkach zbliżonych do stanu równowagi). Metoda otrzymywania stopów na drodze mielenia proszków.

## **5. Chemia środowiska i biochemia**

### **Chemia środowiska**

Definicja środowiska, opis zjawisk kosmicznych i ich wpływ na różne zjawiska na ziemi, powstanie pierwiastków – od wielkiego wybuchu do tworzenia gwiazd, proporcje pierwiastków we wszechświecie, układ słoneczny, orbita Ziemi, Słońce i aktywność słoneczna. Ziemia, struktura wnętrza ziemi, litosfera, płaszcz, jądro wewnętrzne i zewnętrzne, geochemia, pierwiastki występujące w skorupie ziemskiej, reakcje chemiczne w skorupie ziemskiej. Atmosfera, skład i struktura, niszczenie warstwy ozonowej, efekt cieplarniany. Omówienie własności i zastosowania najważniejszych pierwiastków od wodoru do żelaza, sposobu ich pozyskiwania oraz ich najważniejszych związków. Źródła energii: energia słoneczna, energia z paliw kopalnych, energia jądrowa, fuzja termojądrowa, fotosynteza, ogniwa fotowoltaiczne, energia wody i wiatru, metody wykorzystania. Chemia życia: proteiny, DNA, przyswajanie azotu przez rośliny, obieg węgla i azotu w biosferze. Substancje życia codziennego, detergenty, alkohole, słodycze, toksyny, perfumy, polimery.

### **Na pograniczu chemii, fizyki, biologii i technologii supramolekularnej**

Rozpoznawanie molekularne i chiralne. Samoorganizacja, samoasocjacja, preorganizacja. Kompleksy inkluzyjne typu „gość-gospodarz”. Struktury mezoskopowe jako stadium pośrednie między cząsteczkami chemicznymi a strukturami polimerycznymi. Na pograniczu biochemii i klasycznej chemii organicznej – naśladowanie (mimicking) i zrozumienie przyrody ożywionej. Rola samoorganizacji i samoasocjacji w przyrodzie (wirus mozaiki tytoniowej, helikalna budowa DNA, błony komórkowe). Modelowanie procesów w organizmach żywych. Na pograniczu między chemią supramolekularną a technologią. Inżynieria krystaliczna. Nanotechnologia. Elektronika molekularna. Sensory. Optoelektronika. Kataliza supramolekularna.

### **Chemia leków**

Wiadomości ogólne (historia rozwoju chemii leków, mechanizm działania leków, klasyfikacja leków). Leki działające na ośrodkowy układ nerwowy. Leki działające na układ krążenia. Leki działające na układ oddechowy. Leki działające na drobnoustroje chorobotwórcze. Leki przeciwwrobacze. Leki przeciwnowotworowe (cytostatyki). Witaminy. Hormony. Leki przeciwparkinsonowskie. Leki stosowane w chorobach i niedoborze krwi.

Propozycje:

Reakcje chemiczne w żywych organizmach (prof. dr hab. Robert Hołyst)

Oddziaływania w chemii: od elektronów i protonów po cząstki koloidalne. (prof. dr hab. Robert Hołyst)