

UCHWAŁA NR 10
RADY DYDAKTYCZNEJ WYDZIAŁU CHEMII

z dnia 7 kwietnia 2020r.

**w sprawie szczegółowych zasad dyplomowania na kierunku Chemiczna
Analiza Instrumentalna organizowanym na Wydziale Chemii Uniwersytetu
Warszawskiego**

Na podstawie § 68 ust. 2 Statutu Uniwersytetu Warszawskiego (Monitor UW z 2019 r. poz. 190) oraz Uchwały nr. 4 Uniwersyteckiej Rady ds. Kształcenia (URK) dotyczących procesu dyplomowania na Uniwersytecie Warszawskim Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii postanawia, co następuje:

§ 1

1. Formułuje się szczegółowe zasady dyplomowania na kierunku Chemiczna Analiza Instrumentalna organizowanym na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.

2. Zasady, o których mowa w ust. 1, stanowią załącznik do uchwały.

§ 2

Uchwała wchodzi w życie z dniem podjęcia.

Przewodniczący Rady Dydaktycznej

Dr hab. Beata Krasnodębska-Ostręga

do uchwały nr 10 Rady Dydaktyczna Wydziału Chemii z dnia 3 kwietnia 2020 r. w sprawie wytycznych dotyczących procesu dyplomowania na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego

**SZCZEGÓŁOWE ZASADY DYPLOMOWANIA
NA KIERUNKU CHEMICZNA ANALIZA INSTRUMENTALNA
ORGANIZOWANYM NA WYDZIALE CHEMII UNIWERSYTETU
WARSZAWSKIEGO**

§ 1

1. Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii w drodze uchwały określa szczegółowe zasady procesu dyplomowania na kierunku Chemiczna Analiza Instrumentalna składające się z:

- 1). Szczegółowe zasady przygotowywania i oceny prac dyplomowych.
- 2). Szczegółowe zasady przeprowadzania prac dyplomowych - postanowienia ogólne.
- 3). Szczegółowe zasady przeprowadzania prac dyplomowych na studiach pierwszego stopnia.
- 4). Szczegółowe zasady monitorowania procesu dyplomowania.

§ 2

1. Szczegółowe zasady przygotowania i oceny pracy dyplomowej.

- 1). Pracę dyplomową składa się w formie papierowej w trzech egzemplarzach.
- 2). Praca dyplomowa powinna zawierać następujące elementy:
 - streszczenie,
 - opis aktualnego stanu wiedzy na dany temat i wyjaśnienie celowości podjęcia danych badań,
 - hipoteza badawcza lub cel pracy,
 - metodyka badań lub część eksperymentalna,
 - omówienie uzyskanych wyników i ich dyskusja,
 - wnioski,
 - spis cytowanej literatury.
- 3). Praca dyplomowa może być napisana w języku angielskim. Wówczas w pracy umieszcza się wymagane odrębnymi przepisami elementy (streszczenie, oświadczenia studenta i kierującego pracą) w języku pracy i w języku polskim.
- 4). Praca dyplomowa oceniana jest zgodnie z wytycznymi Regulaminu Studiów UW (§ 46 ust. 1 i 13) oraz wytycznymi dotyczącymi procesu dyplomowania na Uniwersytecie Warszawskim (URK Uchwała nr. 4 § 2 ust. 2 pkt 1 i 2) odpowiednio dla pracy dyplomowej na studiach pierwszego stopnia tematyka pracy określana jest przez kierującego pracą, tak aby przygotować studenta do prowadzenia badań

naukowych. Prowadzone badania powinny być zgodne z aktualnym stanem wiedzy, a praca może mieć charakter odtwórczy w oparciu o opublikowane dane lub patenty. Wówczas opisuje się metodykę badań zaprezentowanych w cytowanej literaturze i własne wyniki.

5). Recenzja pracy dyplomowej musi zawierać następujące elementy: imię i nazwisko autora, tytuł, imię i nazwisko kierującego lub recenzenta pracy, miejsce wykonania pracy, ocenę zgodności treści pracy z tematem określonym w tytule, ocenę formalną pracy (układ pracy, poprawność języka, opanowanie techniki pisanie pracy), ocenę merytoryczną pracy, sposób wykorzystania pracy (publikacja, materiał źródłowy, itp.), inne uwagi oraz ocenę pracy zgodnie ze skalą ocen określoną w § 34 ust. 2 Regulaminu Studiów na UW. Recenzja pracy dyplomowej musi być zatwierdzona i udostępniona studentowi na co najmniej trzy dni przed terminem egzaminu dyplomowego.

6) Zgodnie z Regulaminem UW (§ 46 ust. 6) wspólne przygotowanie pracy dyplomowej przez studentów jest dopuszczane po pozytywnym zaopiniowaniu przez Radę Dydaktyczną Wydziału Chemii wniosku kierującego pracą.

§3

W celu przeprowadzenia egzaminu dyplomowego w języku angielskim, student składa odpowiedni wniosek równocześnie ze złożeniem pracy dyplomowej.

§4

1. Szczegółowe zasady przeprowadzania egzaminu dyplomowego na studiach pierwszego stopnia obejmują:

1). Egzamin dyplomowy studiów pierwszego stopnia składa się:

- z krótkiej ustnej prezentacji wyników i treści pracy przez dyplomanta,
- odpowiedzi na co najmniej trzy pytania dotyczące pracy, zadane przez członków komisji egzaminacyjnej,
- odpowiedzi na cztery pytania, które zdający losuje, po jednym z następujących działów chemii:

- chemii nieorganicznej i analitycznej,
- chemii organicznej, technologii chemicznej i biochemii,
- chemii fizycznej i spektroskopii,
- chemii teoretycznej i krystalografii.

2). Na stronie Wydziału Chemii jest udostępniany zakres wymagań do egzaminu dyplomowego na studiach pierwszego stopnia z następujących działów chemii określonych w pkt. 1). Zakres ten przygotowujący jest przez zespół nauczycieli akademickich wskazanych przez KJD i stanowi załącznik nr 2 do uchwały.3). Komisja egzaminacyjna podczas egzaminu dyplomowego pierwszego stopnia składa się z:

- przewodniczącego (spoza działu określonego podczas składania dokumentów dotyczących wyboru specjalizacji)
- kierującego pracą

- recenzenta
- dwóch członków komisji reprezentujących pozostałe działy.

4). Na wniosek KJD, Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii ustala listę nauczycieli akademickich (maksymalnie 5 osób z każdego z działów chemii określonych w pkt. 1).) spośród których będzie wybieranych dwóch członków komisji, o których mowa w § 4 ust. 3.

5). Komisja ocenia wszystkie części składowe odpowiedzi ustnej łącznie stosując skalę, o której mowa w § 34 ust. 3 Regulaminu Studiów na UW. Ocena uzyskana z czterech losowanych pytań stanowi 50% końcowego wyniku egzaminu dyplomowego studiów pierwszego stopnia.

6). Wynik studiów pierwszego stopnia, o którym mowa w § 52 Regulaminu Studiów na UW, stanowi ocena z pracy (0.2), średnia z ocen ze studiów (0.7) oraz ocena z egzaminu dyplomowego (0.1) zaokrąglona do 0,5 przy stosowaniu skali, o której mowa w § 34 ust. 3 Regulaminu Studiów na UW.

7). Z egzaminu dyplomowego sporządza się protokół, jest on formą zapisu przebiegu egzaminu dyplomowego i decyzji komisji o nadaniu tytułu zawodowego.

§5

W celu uzyskania zaliczenia pracowni inżynierskiej konieczne jest przedłożenie pracy dyplomowej zaakceptowanej przez kierującego pracą dyplomową.

§6

1. Szczegółowe zasady monitorowania procesu dyplomowania określone są w wytycznych dotyczących procesu dyplomowania na Uniwersytecie Warszawskim (URK Uchwała nr. 4 § 4).

1) Analiza procesu dyplomowania odbywa się w terminie od 1 października do 31 grudnia każdego roku akademickiego, a dotyczy obron przeprowadzonych do 30 września ubiegłego roku akademickiego.

2) Rada Dydaktyczna Wydziału Chemii powołuje osobę odpowiedzialną za coroczne monitorowanie procesu dyplomowania, w szczególności terminowości udostępniania studentom recenzji prac dyplomowych.

3) Szczegółowej analizie poddawane są losowo wskazane prace dyplomowe (20% branych prac dyplomowych) oraz te, w których oceny kierującego pracą oraz recenzenta różnią się o co najmniej 1 stopień. Weryfikowane będą poprawność protokołu, zgodność recenzji z wytycznymi (§ 2 ust. 5) oraz zgodność zadanych pytań z wymaganiami z załącznika 2.

4) Protokół z procesu monitorowania dyplomowania zawierający jego ocenę zostaje przedstawiony na styczniowej Radzie Dydaktycznej Wydziału Chemii, po analizie i zaproponowaniu działań naprawczych przesłany do URK.

§7

1. W danym roku akademickim nauczyciel akademicki może kierować maksymalnie trzema pracami dyplomowymi pierwszego stopnia.

2. Jeżeli praca ma charakter interdyscyplinarny decyzją KJD można powołać innego nauczyciela akademickiego na współkierującego pracą z Wydziału.

3. Opiekunem laboratoryjnym pracy dyplomowej na Wydziale Chemii może być jedynie asystent lub doktorant Wydziału Chemii.

§8

Uchwała wchodzi w życie z dniem podjęcia i ma zastosowanie do prac dyplomowych przygotowywanych i egzaminów dyplomowych przeprowadzanych od 1 października 2020 r.

do uchwały nr 10 Rady Dydaktycznej Wydziału Chemii z dnia 3 kwietnia 2020 r. w sprawie wytycznych dotyczących procesu dyplomowania na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego

**WYMAGANIA DO EGZAMINU DYPLOMOWEGO NA STUDIACH PIERWSZEGO STOPNIA NA WYDZIALE CHEMII UNIwersYTETU WARSZAWSKIEGO
DLA KIERUNKU CHEMICZNA ANALIZA INSTRUMENTALNA**

CHEMIA NIEORGANICZNA I ANALITYCZNA

1. Układ okresowy pierwiastków.

- Podział na bloki s, p, d i f. Konfiguracje elektronowe pierwiastków z uwzględnieniem wyjątków: Cr, Cu, Mo, Pd, Ag, Pt, Au.
- Atomy, jony i cząsteczki izoelektronowe.
- Promienie kowalencyjne i jonowe – definicje, wyznaczanie i zmienność w układzie okresowym.
- Wpływ rozmiaru i ładunku jonów na właściwości kwasowo-zasadowe ich połączeń.
- Pojęcia: energii jonizacji, powinowactwa elektronowego, elektroujemności, potencjału standardowego i zmienność tych wielkości w układzie okresowym.
- Związek między elektroujemnością a charakterem wiązań.
- Ustalanie kształtu przestrzennego prostych kowalencyjnych cząsteczek i jonów cząsteczkowych (np. CO₂, NH₃, XeF₄), z uwzględnieniem położenia niewiążących par elektronowych (VSEPR).

2. Właściwości wybranych pierwiastków i ich związków.

Wodór. Warunki i możliwości reakcji H₂ z innymi pierwiastkami. Wodorki metali i niemetalu - podział na wodorki jonowe, kowalencyjne i metaliczne (przykłady połączeń każdej grupy). Wpływ wiązań wodorowych na właściwości NH₃, H₂O i HF. Zastosowanie reakcji spalania wodoru w tlenie w ogniwie paliwowym.

Litowce, berylłowce – reaktywność, reakcje z wodą i tlenem. Twardość wody i jej usuwanie. Zjawisko amfoteryczności na przykładzie Zn(OH)₂ i Al(OH)₃.

Węgiel i krzem. Struktura najważniejszych odmian alotropowych węgla (grafitu, diamentu, fulerenu C₆₀). Węglik CaC₂ i jego reakcja z wodą. SiO₂ i jego reakcja z zasadami. Rola wiązań C-C i Si-O-Si w tworzeniu związków węgla i krzemu.

Azot. Magnetyczne właściwości cząsteczki N₂. Otrzymywanie amoniaku i kwasu azotowego(V). Reakcje redoks roztrawiania metali w HNO₃.

Fosfor. Odmiany alotropowe fosforu i ich struktura. Tlenek fosforu P₄O₁₀ – struktura i reakcje z wodą.

Tlen. Magnetyczne właściwości cząsteczki O₂. Reakcje redoks z udziałem nadtlenu wodoru H₂O₂.

Siarka. Odmiany alotropowe siarki i ich struktura. Oddziaływanie SO₂, H₂S z wodą. Otrzymywanie H₂SO₄.

Fluorowce. Właściwości fizyczne i struktura form pierwiastkowych. Reakcje fluorowców i fluorowcowodorów z wodą. **Pierwiastki bloku d i f.** Przykłady połączeń na różnych stopniach utlenienia: Cr^{3+} , CrO_4^{2-} , Mn^{2+} , MnO_2 , MnO_4^- , Fe^{2+} , Fe^{3+} , błękit pruski, Co^{2+} , Co^{3+} . Równania reakcji redoks z udziałem jonów metali przejściowych. Zależność położenia równowagi $\text{CrO}_4^{2-}/\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ od pH roztworu. Typowe i nietypowe stopnie utlenienia lantanowców. Wpływ kontrakcji lantanowej na właściwości zasadowe wodorotlenków lantanowców.

3. Związki kompleksowe.

- Przykłady kompleksów o typowych liczbach koordynacyjnych: 2 (liniowych), 4 (tetraedrycznych i płaskich kwadratowych) i 6 (oktaedrycznych).
- Etylenodiamina i EDTA jako ligandy wielokleszczowe (chelatujące).
- Schemat rozszczepienia orbitali d jonu centralnego w oktaedrycznym polu ligandów.
- Pojęcie kompleksów wysoko- i niskospinowych.
- Zależność magnetycznych właściwości kompleksów od siły pola ligandów.

4. Uniwersalne podstawy analizy chemicznej.

- Walidacja metody analitycznej.
- Rodzaje błędów w analizie chemicznej
- Kryteria wyboru metody instrumentalnej
- Podstawowe pojęcia z zakresu chemii analitycznej (czułość, zakres liniowy, ślepa próbka, granica wykrywalności i oznaczalności, dokładność, precyzja, powtarzalność, odtwarzalność, roztwór wzorcowy, krzywa kalibracyjna, selektywność)
- Podstawy pomiaru analitycznego (metoda krzywej kalibracyjnej, metoda dodatku wzorca, metoda dodatku wzorca wewnętrznego)
- Rola automatyzacji w analizie chemicznej
- Podstawy nefelometrii i turbidymetrii
- Cyfry znaczące.
- Definicja kwasu i zasady w teorii Brønsteda.
- Sprzężone pary kwas-zasada.
- Hydroliza soli jako reakcja kwasowo-zasadowa.
- Definicja kwasu i zasady w teorii Lewisa.
- pH roztworów słabych i mocnych kwasów, zasad, soli kwasów i zasad o różnej względnej mocy.
- pH roztworu buforowego.
- Pojęcie iloczynu rozpuszczalności i jego związek z rozpuszczalnością molową substancji.
- Wpływ wspólnego jonu, obcych jonów, protonowania i kompleksowania na rozpuszczalność osadów.

5. Elementy analizy jakościowej.

- Barwy płomienia palnika wywoływane przez lotne połączenia pierwiastków.
- Barwy roztworów związków: litowców, berylówców, Cr(III) , Cr(VI) , Mn(II) , Mn(VI) , Mn(VII) , Fe(II) , Fe(III) , Co(II) , Ni(II) , Cu(II) , Zn(II) , Ag(I) , Au(I) , Hg(II) , Hg(I) .

- Rozpuszczalność w wodzie chlorków, azotanów(V), siarczanów(VI), siarczków i węglanów tych metali.
- Podstawa podziału kationów na grupy analityczne.
- Wybrane barwne reakcje charakterystyczne: Fe(III) z SCN^- , Fe(III) z Fe(CN)_6^{4-} , Cu(II) z NH_3 , Co(II) z SCN^- , Ni(II) z dimetyloglioksymem.
- Porównanie reakcji Al(III) i Cr(III) z NaOH.
- Rozróżnienie Cl^- , Br^- i I^- na podstawie reakcji z AgNO_3 .

6. Elementy analizy ilościowej.

Analiza wagowa. Metodyka typowych oznaczeń, np. siarczanów w postaci BaSO_4 lub wapnia w postaci CaO. Istota minimalizacji strat osadu w trakcie przemysławania.

Analiza miareczkowa. pH punktu równoważności w miareczkowaniach słabych i mocnych kwasów i zasad. Definicja buforu porównawczego. Typowe wskaźniki pH: fenoloftaleina, oranż metylowy i optymalny dobór wskaźnika do danego miareczkowania. Zasada alkacymetrycznego oznaczania mieszanin węglanów, wodorowęglanów i wodorotlenków. Oznaczanie wapnia i magnezu za pomocą EDTA jako przykład miareczkowania kompleksometrycznego.

Elementy analizy instrumentalnej. Technika miareczkowania redoks z elektrodą platynową jako elektrodą wskaźnikową i elektrodą kalomelową jako elektrodą odniesienia. Obliczanie potencjału redoks układu w punkcie równoważności. Prawo Lamberta-Beera jako podstawa spektrofotometrii absorpcyjnej. Molowy współczynnik absorpcji. Równanie Ilkoviča jako podstawa analizy ilościowej metodą polarograficzną. Zasada i zastosowanie metody woltamperometrii inwersyjnej. Potencjometria i elektrody jonoselektywne. Atomowa spektrometria emisyjna i absorpcyjna.

CHEMIA ORGANICZNA, TECHNOLOGIA CHEMICZNA I BIOCHEMII

1. Węglowodory i ich pochodne.

- Podział na klasy. Hybrydyzacja atomu węgla.
- Struktura węglowodorów: alkany, cykloalkany, alkeny, alkiny, związki aromatyczne (charakter aromatyczny, reguła Hückla).

Konformacja: alkanów (etan, butan, wolna rotacja), cykloalkanów (trwałość pierścieni).

Izomeria: szkieletowa, geometryczna (*cis/trans*, *Z/E*), optyczna (konfiguracja absolutna *R/S* i jej oznaczanie, reguły Cahn-Ingolda-Preloga; enancjomery, diastereoizomery, mieszanina racemiczna, konfiguracja względna).

Alkany. Właściwości i otrzymywanie. Substytucja wolnorodnikowa (mechanizm SR, orientacja reakcji). Struktura wolnego rodnika. Trwałość wolnych rodników. Cykloalkany: właściwości i reakcje.

Alkeny. Właściwości i otrzymywanie. Addycja elektrofilowa halogenowodoru i halogenu (mechanizm AdE, reguła Markownikowa). Trwałość karbokationów. Addycja wolnorodnikowa bromowodoru (mechanizm AdR). Uwodornianie i ozonoliza alkenów.

Alkiny: właściwości i otrzymywanie. Reakcje alkinów (addycja wodoru, halogenu, halogenowodoru, wody).

Węglowodory aromatyczne (benzen). Substytucja elektrofilowa związków aromatycznych (mechanizm SE). Nitrowanie, sulfonowanie, chlorowcowanie, alkilowanie, acylowanie. Wpływ kierujący podstawników (efekt indukcyjny i mezomeryczny). Alkilowe pochodne benzenu, substytucja w łańcuchu bocznym.

Chlorowcopochodne: właściwości i otrzymywanie. Chlorowcoalkany: substytucja nukleofilowa, mechanizmy i stereochemia reakcji SN1 i SN2. Reakcje eliminacji, mechanizmy E1 i E2. Reaktywność chlorowcopochodnych alkilowych, alilowych, winylowych i aromatycznych.

Alkohole. Właściwości i otrzymywanie. Klasyfikacja. Reakcje substytucji SN1 i SN2. Reakcje eliminacji (dehydratacja).

Aminy. Właściwości i otrzymywanie. Klasyfikacja amin. Alkilowanie amin. Sole amin i czwartorzędowe sole amoniowe. Aminy aromatyczne - substytucja w pierścieniu. Reakcje amin z kwasem azotawym (azotowym(III)), reakcje soli diazoniowych.

2. Związki karbonylowe i ich pochodne.

Aldehydy i ketony. Właściwości i otrzymywanie. Reakcje utleniania i redukcji. Addycja nukleofilowa (AdN) do grupy karbonylowej: przyłączanie wody, alkoholi, cyjanowodoru, wodorosiarczyny (wodorosiarczynu(IV)), pochodnych amoniaku, związków Grignarda. Reakcje Cannizzaro i kondensacji aldolowej (mechanizmy).

Kwasy karboksylowe i ich pochodne. Właściwości i otrzymywanie. Klasyfikacja kwasów karboksylowych. Wpływ budowy na moc kwasów karboksylowych. Sole. Otrzymywanie chlorków i bezwodników kwasowych oraz estrów i amidów, porównanie ich reaktywności. Estry: mechanizm estryfikacji i hydrolizy, mechanizm kondensacji Claisena). Redukcja kwasów karboksylowych i ich pochodnych.

Związki heterocykliczne. Heterocykliczne układy pięcio- i sześciocłonowe z jednym heteroatomem. Reakcje S_E pirolu, tiofenu, furanu. S_E pirydyny.

Związki wielofunkcyjne. Hydroksyketony, hydroksyaldehydy, chlorowcokwasy, aminokwasy, związki dwukarbonylowe – otrzymywanie i reakcje. Tautomeria keto-enolowa.

3. Identyfikacja związków organicznych metodami spektralnymi.

Umiejętność interpretacji prostych widm ¹H-NMR, ¹³CNMR oraz widm w podczerwieni (znajomość częstości drgań dla podstawowych grup funkcyjnych) w celu identyfikacji związków.

4. Biochemia.

- Budowa i funkcja błon biologicznych.
- Przepuszczalność i transport przez błony.
- Hierarchiczna budowa białek (struktura I-, II-, III- i IV-rzędowa).
- Metody stosowane do przewidywania i ustalania struktury przestrzennej białek.
- Budowa enzymów, ich klasyfikacja.
- Mechanizm działania i cechy charakterystyczne enzymów.
- Czynniki wpływające na szybkość reakcji enzymatycznych.

- Podstawowe pojęcia metabolizmu (termodynamika reakcji biochemicznych, reakcje sprzężone, związki o wysokim potencjale fosforylacyjnym, podstawowe zasady organizacji metabolizmu).
- ATP jako główny nośnik energii w komórce.
- Oddychanie komórkowe, fosforylacja substratowa i oksydacyjne.
- Budowa DNA.
- Rodzaje i rola RNA.
- Proces replikacji, transkrypcji i translacji.

5. Podstawy technologii chemicznej.

- Efektywność, wydajność, selektywność i energochłonność procesu technologicznego.
- Bilanse materiałowe i energetyczne procesu.
- Zasady technologiczne.
- Wymiana masy i ciepła. Mechanizmy ruchu ciepła i procesy związane z ich ruchem.
- Kinetyka reakcji chemicznej w skali przemysłowej.
- Kataliza homogeniczna, heterogeniczna i enzymatyczna w technologii chemicznej i biotechnologii.
- Przemysłowe procesy wydzielania i oczyszczania.

Technologia i gospodarka. Pierwotne surowce energetyczne i chemiczne. Etapy przeróbki ropy naftowej, charakterystyka paliw i produktów otrzymywanych z ropy naftowej. Polimery naturalne i syntetyczne. Ochrona środowiska: recykling, utylizacja ścieków i odpadów przemysłowych.

CHEMIA FIZYCZNA I SPEKTROSKOPIA

1. Termodynamika.

Podstawowe pojęcia. Energia, praca, ciepło. Pojęcie funkcji stanu. Pierwsza zasada termodynamiki. Energia wewnętrzna U , entalpia H i ich zmiany w różnych procesach.

Termochemia. Efekt cieplny reakcji pod stałym ciśnieniem i w stałej objętości. Zmiany entalpii standardowej w przemianach fizycznych i chemicznych. Prawo Hessa i jego zastosowania. Prawo Kirchhoffa.

Entropia S . Druga zasada termodynamiki. Sens fizyczny entropii. Zależność S od temperatury. Procesy termodynamicznie odwracalne i nieodwracalne. Trzecia zasada termodynamiki.

Energia swobodna (energia Helmholtza) $A(F)$ i entalpia swobodna (energia Gibbsa) G . Termodynamiczne kryteria przebiegu reakcji oparte na zmianach funkcji S , $A(F)$ i G . Potencjał chemiczny. Warunki równowagi termodynamicznej.

2. Stan równowagi chemicznej. Stała równowagi reakcji chemicznej (K) i wpływ różnych czynników na jej wartość. Stałe równowagi wyrażone poprzez ciśnienia cząstkowe, stężenia i ułamki molowe. Związek między ΔG° i K . Wpływ różnych czynników na stan równowagi - reguła przekory.

Gazy. Gazy doskonałe a gazy rzeczywiste. Równanie Clapeyrona i równanie van der Waalsa. Temperatura krytyczna. Pojemność cieplna gazów doskonałych.

Przemiany fazowe w układach jedno- i wieloskładnikowych. Diagramy fazowe substancji czystych (woda, CO_2). Punkt potrójny. Reguła faz Gibbsa. Prawo Raoult'a. Diagramy fazowe układów dwuskładnikowych (azeotropy dodatnie i ujemne, eutektyki).

3. Elektrochemia.

Roztwory elektrolitów. Solwatacja jonów. Aktywność jonów w roztworach elektrolitów. Współczynnik aktywności. Prawo graniczne Debye'a-Hückela.

Potencjały elektrodowe i ogniwa galwaniczne. Pojęcie elektrody i jej potencjału. Potencjał standardowy. Równanie Nernsta. Elektrody I i II rodzaju oraz typowe elektrody odniesienia: wodorowa, kalomelowa, chlorosrebrowa – reakcje, opis potencjału poprzez równanie Nernsta. Elektrody do pomiaru pH. Ogniwa galwaniczne, rodzaje ogniw i reakcje w nich zachodzące. Obliczanie i eksperymentalne wyznaczanie siły elektromotorycznej (SEM). Konwencja sztokholmska. Związek między ΔG reakcji i SEM. Wyznaczanie wielkości termodynamicznych z pomiarów SEM.

Elektroliza. Prawo Faradaya. Elektroliza wodnych roztworów różnych soli – reakcje elektrodowe. Nadpotencjał (nad napięcie) procesu elektrodowego. Prąd dyfuzyjny i kinetyczny.

4. **Kinetyka.** Szybkość reakcji chemicznej – definicja i wpływ różnych czynników. Rząd reakcji (cząstkowy, całkowity) i metody jego wyznaczania. Równania kinetyczne i zmiany stężeń reagentów w czasie dla reakcji różnych rzędów. Czas połowicznej przemiany. Energia aktywacji i równanie Arrheniusa. Teoria kompleksu aktywnego. Pojęcie i rola katalizatora.

Dyfuzja. I prawo Ficka. Gradient stężenia i współczynnik dyfuzji.

Koloidy - potencjał elektrokinetyczny. Elektroforeza i ruchliwość elektroforetyczna. Punkt izoelektryczny.

Elektryczne i magnetyczne właściwości substancji. Trwałe i indukowane momenty dipolowe cząsteczki. Względna przenikalność elektryczna. Paramagnetyzm, diamagnetyzm, ferromagnetyzm. Podatność magnetyczna. Prawo Curie.

5. Spektroskopia.

- Natura i właściwości promieniowania elektromagnetycznego.
- Kwantowanie energii stanów rotacyjnych, oscylacyjnych (z uwzględnieniem drgań anharmonicznych) i elektronowych molekuly.
- Obsadzenie poziomów energetycznych według rozkładu energii Boltzmanna.
- Zakres widma promieniowania a typ przejść widmowych.
- Reguły wyboru w absorpcyjnej spektroskopii rotacyjnej i oscylacyjnej.
- Nieelastyczne rozpraszanie promieniowania: pasma stokesowskie i antystokesowskie.
- Reguły wyboru w oscylacyjnej spektroskopii ramanowskiej.
- Położenie na osi długości fali widma luminescencyjnego (fluorescencji i fosforescencji) w stosunku do odpowiedniego absorpcyjnego widma elektronowego.
- Idea spektroskopii EPR.

- Struktura nadsubtelna widm EPR.
- Spektroskopia NMR: oddziaływanie jąder atomowych o niezerowym momencie magnetycznym z zewnętrznym polem magnetycznym, ekranowanie jądra i przesunięcie chemiczne.
- Wzajemne oddziaływania jąder (sprzężenie spinowo-spinowe).
- Podstawy i zastosowanie spektroskopii fotoelektronów
- Podstawy i zastosowanie mikroskopii sił atomowych

CHEMIA KWANTOWA I KRYSTALOGRAFIA

1. Krystalografia.

- Podstawowe pojęcia: cechy kryształów, projekcja sferyczna, i stereograficzna, sieć przestrzenna, układy krystalograficzne, typy komórek Bravais.
- Symetria punktowa, operacje i elementy symetrii, współistnienie elementów symetrii, grupy punktowe nomenklatura Schoenfliesa i Hermanna – Maugina.
- Złożone elementy symetrii. Sieci przestrzenne, Obiekty geometryczne w sieciach przestrzennych (węzły, proste i płaszczyzny). Definicja wskaźników Millera.
- Grupy przestrzenne, struktury gęstego i najgęstszego upakowania, sieć odwrotna, definicja i własności, konstrukcja Ewalda, podstawy rentgenowskiej analizy strukturalnej kryształów.

2. Chemia kwantowa.

- Statystyczna interpretacja funkcji falowej.
- Poziomy energetyczne (degeneracja, odległości sąsiednich poziomów), funkcje falowe (od jakich zmiennych zależą, liczba węzłów) oraz liczby kwantowe dla następujących układów kwantowych: jednowymiarowe pudło potencjału, jednowymiarowy oscylator harmoniczny, rotator sztywny, atomu wodoru i jony wodoropodobne (tu także kontury funkcji s , p , d).
- Przybliżenie jednoelektronowe.
- Orbitale i spinorbitale.
- Funkcja falowa dla układu wieloelektronowego.
- Zakaz Pauliego.
- Metoda Hartree-Focka.
- Konfiguracje elektronowe atomów i jonów wieloelektronowych.
- Reguły Hunda.
- Symbole termów atomowych (term podstawowy atomu wieloelektronowego).
- Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
- Metoda orbitali molekularnych (MO). Metoda LCAO MO.
- Mechanizm powstawania wiązania chemicznego w ujęciu metody MO.
- Orbitale molekularne dla dwuatomowych cząsteczek homojądrowych (σ_g , σ_u , π_g , π_u).
- Orbitale wiążące, antywiążące i niewiążące.
- Poziomy energetyczne i konfiguracje elektronowe dwuatomowych cząsteczek homojądrowych pierwiastków drugiego okresu i prostych dwuatomowych cząsteczek heterojądrowych.

- Krzywe energii potencjalnej dla cząsteczki dwuatomowej (poziomy oscylacyjne i rotacyjne cząsteczki).
- Metoda orbitali molekularnych dla cząsteczek wieloatomowych.
- Hybrydacja orbitali. Orbitale zhybrydowane typu: sp , sp^2 , sp^3 .