

Termodynamika

Układ, równanie stanu, I zasada termodynamiki, definicja energii wewnętrznej i entalpii. Funkcje stanu a parametry stanu. Termochemia: ciepło molowe, ciepło reakcji w stałej objętości i pod stałym ciśnieniem, prawa Kirchoffa i Hessa. Ciepło tworzenia i ciepło spalania.

II zasada termodynamiki, definicja entropii. Zmiana entropii i entalpii w procesie odwracalnym i nieodwracalnym. Energia swobodna i entalpia swobodna, związki między funkcjami U, H, G, F i S, kryteria samorzutności procesów. Powinowactwo chemiczne. Praca, ciepło i przyrosty funkcji stanu w przemianach gazu doskonałego (izobaryczna, izochoryczna, izotermiczna, adiabatyczna).

Równowagi fazowe.

Potencjał chemiczny, reguła faz, równanie Clausiusa i Clausiusa-Clapeyrona, ciepło przemiany fazowej, diagramy fazowe dla układów jedno- i dwuskładnikowych. Warunki równowagi w układzie wielofazowym wieloskładnikowym.

Pojęcie i termodynamiczne właściwości roztworu doskonałego. Prawo Raoult'a, prawo Henry'ego. Roztwór cieczy w cieczy o nieograniczonej rozpuszczalności, zeotropia i azeotropia dodatnia i ujemna. Układy ciekłe z ograniczoną mieszalnością. Wpływ temperatury na mieszalność.

Roztwory ciał stałych w cieczach. Obniżenie prężności pary nad roztworem. Podwyższenie temperatury wrzenia, obniżenie temperatury krzepnięcia. Równowagi Donnana. Ciśnienie osmotyczne. Dwuskładnikowe układy z ograniczoną mieszalnością i całkowitą niemieszalnością. Układy trójskładnikowe ciekłe, trójkąt Gibbsa.

Prawo podziału Nernsta, odstępstwa. Proces ekstrakcji. Zastosowanie współczynnika podziału w projektowaniu substancji leczniczych.

Zjawiska na granicy faz.

Lepkość, napięcie powierzchniowe, adsorpcja fizyczna i chemiczna. Rodzaje koloidów, własności optyczne, kinetyczne i elektryczne koloidów, koagulacja. Układy dyspersyjne: emulsje, żele, zawiesiny, mikrocząstki, liposomy.

Definicja adsorpcji, rodzaje adsorpcji i sposoby ich rozróżniania. Zależność adsorpcji od temperatury, ciśnienia i rodzaju substancji. Izotermy adsorpcji (Freundlicha, Langmuira, BET), wykresy, zastosowanie. Kondensacja kapilarna. Zastosowanie zjawiska adsorpcji w farmacji i chemii.

Definicja napięcia powierzchniowego, wzory, jednostki, zależność od różnych parametrów. Metody pomiaru napięcia powierzchniowego. Izoterma Gibbsa: wzór, wykres, zastosowanie. Budowa i właściwości substancji powierzchniowo czynnych oraz ich zastosowanie w farmacji. Definicja krytycznego stężenia micelizacji oraz sposoby jego wyznaczania. Wpływ budowy i właściwości substancji powierzchniowo czynnych na rodzaj tworzonej emulsji na granicy faz woda-olej.

Definicja i rodzaje lepkości (dynamiczna, kinematyczna, względna), prawo Newtona; jednostki w układzie SI. Wpływ temperatury i ciśnienia na lepkość cieczy. Lepkość roztworów polimerów, cieczy niutonowskie i nieniuonowskie. Budowa i właściwości elektryczne (podwójna warstwa elektryczna, potencjał elektrokinetyczny) i optyczne koloidów liofilowych i liofobowych.. Definicja punktu izoelektrycznego koloidu oraz jego ilustracja graficzna. Koagulacja.

Statyka

Stałe równowagi (definicja, rodzaje), prawo działania mas, metody wyznaczania stałej równowagi. Reguła przekory. Wpływ temperatury i katalizatora na stałą równowagi reakcji. Izobara, izoterma oraz izochora van't Hoffa. Termodynamiczne warunki istnienia stanu równowagi. Reakcje odwracalne i nieodwracalne.

Kinetyka

Chwilowa i średnia szybkość reakcji chemicznej. Równania kinetyczne reakcji I, II, III oraz ułamkowego i zerowego rzędu. Stałe szybkości. Czasy połówkowe. Metody wyznaczania rzędu reakcji i stałych szybkości. Reakcje równoległe i następcze. Reakcje odwracalne.

Wpływ temperatury na szybkość reakcji. Równanie Arrheniusa. Teoria zderzeń aktywnych i kompleksu aktywnego (stanu przejściowego). Energia aktywacji i metody jej wyznaczania. Reakcje z udziałem

katalizatorów. Kataliza: dodatnia i ujemna, homogeniczna, heterogeniczna, autokataliza. Kinetyka reakcji enzymatycznych, równanie Michaelisa-Menten.

Elektrochemia

Oddziaływanie jon-rozpuszczalnik, jon-jon, dyfuzja, ruchliwość jonów, przewodzenie prądu w roztworach, przewodnictwo elektryczne elektrolitów, przewodnictwo właściwe, przewodnictwo molowe, ruchliwość jonowa, liczba przenoszenia jonów, prawo Kohlrauscha niezależnej migracji jonów podwójna warstwa elektryczna, zjawiska elektrokinetyczne (elektroforeza, elektroosmoza).

Typy półogniw – przykłady, reakcje chemiczne zachodzące w półogniwach. Typy ogniw. Przyrosty wartości funkcji termodynamicznych dla reakcji zachodzącej w badanym ogniwie. Potencjał dyfuzyjny. Klucz elektrolityczny.

Teorie kwasowo-zasadowe, stopień dysocjacji, teoria mocnych elektrolitów, aktywność, współczynnik aktywności, prawo rozcieńczeń Ostwalda.

Spektroskopia molekularna.

Zjawisko pochłaniania promieniowania, mechanizm wzbudzenia, widma absorpcyjne. Prawo Lamberta-Beera. Przyczyny odstępstw od prawa Lamberta-Beera. Addytywność absorpcji światła.

Światło spolaryzowane. Skręcalność właściwa.

Polaryzowalność i momenty dipolowe molekuł, rotacje i oscylacje. Widma absorpcyjne w podczerwieni i widma Ramana. Widma elektronowe, absorpcyjne UV-vis. Luminescencja, fluorescencja, fosforescencja.

Podstawy teorii magnetycznego rezonansu jądrowego (pojęcie spinu, warunku rezonansu, relaksacji, przesunięcia chemicznego, struktury subtelnej, wartości całkowitych, wymiany chemicznej, zależności stałych sprzężenia od struktury). Metodyka interpretacji widma ^1H i ^{13}C NMR oraz widm dwuwymiarowych. Projektowanie widm NMR. Metoda arytmetyczna i graficzna przy analizie multipletów. Zastosowania metody NMR (w chemii: identyfikacja związków, badania strukturalne, analiza jakościowa i ilościowa, badania dynamiki molekuł, rodzaje badanych jąder; w medycynie: tomografia, spektroskopia *in vivo*).

Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego. Współczynnik rozszczepienia spektroskopowego i stała sprzężenia spinowo-spinowego. Widma EPR prostych rodników organicznych, rodniki tlenowe i ich rola. Wolne rodniki w organizmach, atmosferze oraz w materiałach medycznych i żywności sterylizowanej radiacyjnie. Znaczniki spinowe, pułapki spinowe.

Modelowanie molekularne.

Budowa przestrzenna molekuł: długości wiązań, kąty walencyjne, kąty torsyjne. Oddziaływania wewnątrz- i międzymolekularne. Konfiguracja, konformacja. Kryteria optymalizacji geometrii. Podstawy mechaniki molekularnej: funkcja falowa, jej interpretacja fizyczna. Metody obliczeniowe: podział, podstawy teoretyczne, różnice między nimi. Przykłady zastosowań. Definicja pola siłowego, jakie są wady i zalety metod mechaniki molekularnej. Definicja momentu dipolowego i jego obliczanie dla przestrzennego rozkładu ładunku. Mapa potencjału elektrostatycznego. Wiązania chemiczne: typy, długości, kąty ze szczególnym uwzględnieniem wiązań między atomami węgla o hybrydyzacji sp , sp^2 , sp^3 , węgiel-tlen, węgiel-azot, wiązanie wodorowe. Parametry QSAR.