Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody syntetyczne
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Pseudopolimorfizm w polimerach koordynacyjnych (8 h)

Koordynator: dr hab. Beata Nowicka, prof. UJ

Cel: Przedstawienie możliwości post-syntetycznej modyfikacji polimerów koordynacyjnych na drodze usunięcia lub wymiany cząsteczek gości w strukturze oraz zastosowania grawimetrycznej metody dynamicznej sorpcji par rozpuszczalników do badania form pseudopolimorficznych.

Opis: Metoda dynamicznej sorpcji par w zastosowaniu do hydratów i solwatów umożliwia zaobserwowanie przejść fazowych pomiędzy formami pseudopolimorficznymi i ustalenie warunków ich stabilności. W polimerach koordynacyjnych i układach typu MOF (metal-organic framework) pozwala na zbadanie możliwości dokonania post-syntetycznych modyfikacji, polegających na przebudowie struktury w stanie stałym pod wpływem usunięcia lub wbudowania cząsteczek gości albo wymiany labilnych ligandów. Zajęcia warsztatowe obejmują zbadanie właściwości sorpcyjnych wybranego polimeru koordynacyjnego, a następnie przeprowadzenie post-syntetycznej modyfikacji i obserwację różnic we właściwościach pomiędzy formą pierwotną i zmodyfikowaną związku.

Literatura:

S. Kitagawa, R. Kitaura, S. Noro, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2004, **43**, 2334–2375.

Część 2: Materiały magnetyczne (8 h)

Koordynator: dr hab. D. Pinkowicz, prof. UJ

Cel: Kurs umożliwi zrozumienie w jaki sposób struktura cząsteczek i ciał stałych określa ich właściwości magnetyczne oraz w jaki sposób chemia umożliwia projektowanie układów molekularnych o żądanych właściwościach magnetycznych. Omówione zostaną również podstawowe aspekty multifunkcjonalności materiałów magnetycznych oraz nowe zjawiska występujące w tej klasie związków: przełączanie magnetyczne za pomocą cząsteczek gości, przełączenie światłem oraz multiferroiczność.

Opis: Kurs rozpoczyna się od przeglądu podstawowych pojęć z dziedziny magnetyzmu a następnie koncertuje się na ich zastosowaniu w nowej interdyscyplinarnej dziedzinie: magnetyzmie molekularnym. Molekularny magnetyzm zajmuje się zrozumieniem i opracowywaniem strategii łączenia ze sobą cząsteczek oraz anionów i kationów, aby możliwe było uzyskanie wielordzeniowych układów molekularnych (jak również supramolekularnych) wykazujących nietrywialne właściwości magnetyczne. W trakcie kursu omówione zostaną najbardziej podstawowe jednordzeniowe kompleksy metali przejściowych, jak również złożone wielocentrowe układy koordynacyjne i supramolekularne, paramagentyczne cząsteczki organiczne oraz polimery koordynacyjne i układy typu MOF, których badanie wymaga wiedzy zarówno z dziedziny syntezy chemicznej (organicznej, organometalicznej i koordynacyjnej), chemii fizycznej, analitycznej, krystalografii i inżynierii krystalicznej oraz fizyki ksperymentalnej.

Literatura:

1. D. F. Shriver, M. A. Drezdzon, "The manipulation of air-sensitive compounds", Wiley 1986
2. D. Yeung, J. Penafiel, H. S. Zijlstra, J. S. McIndoe, "Oxidation of titanocene(III): the deceptive implicity of a color change", *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 457-461.
3. S. J. N. Burgmayer, "Use of a titanium metallocene as a colorimetric indicator for learning inert atmosphere techniques", *J. Chem. Educ.* **1998**, *75*, 460

Część 3: Niestandardowe metody syntezy organicznej (8 h)

Koordynator: dr B. Trzewik

Cel: Celem jest przedstawienie nowoczesnych i niestandardowych metod syntezy organicznej

Opis: Czasami nie potrzeba ciepła do utworzenia związku - niestandardowe metody dostarczania energii do układów reakcyjnych.

Zdecydowana większość przemian chemicznych zachodzi dopiero wtedy, kiedy wystarczająca liczba cząsteczek substratu albo substratów uzyska odpowiednią energię. W przypadku wielu reakcji zdarza się, że w temperaturze pokojowej jedynie mała liczba cząsteczek ma energię pozwalającą na pokonanie bariery aktywacji, co powoduje, że szybkość takich reakcji jest niewielka albo nawet niezauważalna. Najczęstszym i klasycznym sposobem spowodowania rozpoczęcia lub skrócenia czasu przemiany chemicznej jest wtedy dostarczenie energii z otoczenia na sposób ciepła przez ogrzanie mieszaniny reakcyjnej. Chociaż prosta, metoda ta posiada zauważalne wady, związane chociażby z dużymi stratami ciepła w przypadku konieczności osiągnięcia wysokiej temperatury, nierównomiernym jego dostarczaniem do układu lub niekontrolowanym wrzeniem ogrzewanej zawartości. Na szczęście można wzbudzić cząsteczki reagentów na wiele innych sposobów, dostarczając energię innego typu niż cieplna. Może to być osiągnięte chociażby przez wykonanie pracy mechanicznej, działanie fal elektromagnetycznych o różnej długości fal: światła bądź mikrofal, działanie ultradźwięków albo prądu elektrycznego. W wielu przypadkach zastosowanie takich niestandardowych metod dostarczania energii do układu reakcyjnego pozwala drastycznie skrócić czas reakcji, zwiększyć ich wydajność i czystość uzyskiwanych produktów lub uniknąć konieczności używania rozpuszczalnika. Zostaną przedstawione przykłady zastosowania takich metod, ich porównanie z klasycznym ogrzewaniem mieszanin reakcyjnych, połączone z krótkimi warsztatami w laboratorium.

Literatura:

1. Baig, R. B. N., Varma, R. S. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 1559–1584
2. Hernández, J. G., Bolm C. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 4007–4019
3. Bruckmann, A.; Krebs, A., Bolm, C. *Green Chem.* **2008**, *10*, 1131–1141
4. Romero, N. A., Nicewicz, D. A. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 10075–10166

Część 4: Synteza organiczna z wykorzystaniem linii Schlenka (8 h)

Koordynator: dr hab. Miłosz Pawlicki, prof. UJ

Cel: Celem kursu jest zapoznanie uczestników z podstawami konstrukcji linii Schlenka i niezbędnego oprzyrządowania pozwalającego na prowadzenie reakcji w atmosferze obojętnej. Część praktyczna bazuje na demonstracji technik niezbędnych do efektywnego wykorzystania linii argono-próżniowej w syntezie, ale także pokazuje możliwości wykorzystania ich do przygotowywania próbek do analizy w atmosferze obojętnej.

Opis: Współczesna synteza organiczna bazuje na wykorzystaniu wszystkich dostępnych reakcji prowadzących do zmian strukturalnych w szkieletach związków organicznych. Szerokie spektrum możliwości modyfikacji pozwala na tworzenie dowolnych połączeń w obrębie szkieletów węglowodorowych, których ściśle zaplanowana struktura pozwala na precyzyjne adresowanie uzyskanych pochodnych do konkretnych zastosowań poczynając od klasycznych aplikacji w chemii medycznej po współczesne materiały o zastosowaniu jako materiały luminescencyjne. Ten szeroki wachlarz możliwych zastosowań wymaga coraz precyzyjniejszych i wydajniejszych ścieżek syntetycznych, których zastosowanie prowadzi do efektywnego otrzymania oczekiwanych związków. Obecnie daje się zauważyć wyraźny nacisk na wykorzystywanie reakcji katalizowanych metalami przejściowymi, które wymagają stosowania warunków reakcji prowadzonych w atmosferze obojętnej z wykorzystaniem linii próżniowo-argonowej. Techniki Schlenka stosowane są zarówno do przeprowadzania określonych syntez, jak i przygotowywania próbek do analizy spektroskopowej procesów przeprowadzanych w atmosferze suchej, ale także chronionej od tlenu. W trakcie zajęć omówione zostaną podstawy konstrukcji linii Schlenka (linia argonowo-próżniowa), a także specyficzne szkło niezbędne do prowadzenia procesów w atmosferze obojętnej. W części praktycznej zademonstrowane zostaną techniki pozwalające na pracę w atmosferze obojętnej i przeprowadzanie w przestrzeni laboratoryjnej reakcji chemicznych wymagających ochrony przed wilgocią i tlenem. Poza podstawowymi technikami odgazowywania rozpuszczalników metodą zamrażania-odpompowywania omówione i zademonstrowane zostaną techniki transferu roztworów (kanulacja) odgazowanego rozpuszczalnika do próbki i jej analiza spektroskopowa pozwalająca na ocenę przygotowanej analizy, a tym samym jakość przeprowadzonych manipulacji z wykorzystaniem linii Schlenka.

Literatura:

1. Herrmann, W. A. et al.: 1996 Synthetic Methods of Organometallic and Inorganic Chemistry (Herrmann/Brauer): Literature, Laboratory Techniques, and Common Starting Materials
2. Shriver, D. F.; Drezdzon, M. A. The Manipulations of Air-Sensitive Compounds, 2nd ed.; Wiley: New York, 1986

Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody obliczeniowe
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Koordynator: dr hab. A. Eilmes, prof. UJ

Treści programowe/opis:

1. stabilność numeryczna algorytmów
2. algebra liniowa
   - rozwiązywanie układów równań liniowych; metody oparte na rozkładach trójkątnych
   - rozkład macierzy według wartości osobliwych; rozwiązywanie nadokreślonych układów równań
   - zagadnienie własne macierzy
   - zagadnienia praktycznej implementacji na współczesnych architekturach komputerowych; biblioteki BLAS i Lapack
3. rozwiązywanie równań i układów równań nieliniowych
4. równania różniczkowe
   - równania i układy równań różniczkowych zwyczajnych; układy sztywne
   - przykłady rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych
5. optymalizacja
   - metoda sympleksów; metody gradientowe
   - znajdowanie minimum globalnego; symulowane wyżarzanie; algorytmy genetyczne

Literatura:

Obowiązkowa: D. Kincaid, W. Cheney, Analiza numeryczna, WNT

Uzupełniająca: Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, Metody numeryczne, WNT; dokumentacja dostępna w Internecie.

Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody mikroskopowe
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	4
Liczba godzin	40
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Mikroskopia SEM oraz TEM (20 h)

Koordynator: prof. dr hab. Zbigniew Sojka

Cel: Kurs mikroskopii elektronowej ma na celu dostarczenie podstaw teoretycznych i doświadczalnych w zakresie wykorzystania technik mikroskopii elektronowej do badań struktury, morfologii i składu chemicznego materiałów nieorganicznych i katalizatorów heterogenicznych, wymaganych do interpretacji obrazów SEM i S/TEM, dyfrakcji elektronów oraz do ilościowej analizy EDX i EELS.

Opis: Wykład obejmuje podstawy fizyczne optyki geometrycznej, falowej I fourierowskiej. Podstawy obrazowania koherentnego i niekoherentnego, funkcja transmisji układu optycznego. Optyka elektronowa i podstawowe rodzaje dział elektronowych. Oddziaływanie wiązki elektronowej z materiałem i rodzaje powstających sygnałów. Budowa i tryby działania mikroskopu elektronowego. Mechanizm powstawania obrazu i rodzaje kontrastu. Obrazowanie w skali mikro- i nano-metrycznej (morfologia). Metody analizy kształtu ziaren. Wysokorozdzielcza mikroskopia elektronowa i obrazowanie w skali pikometrycznej (struktura atomowa). Metody analizy rozmiaru i dyspersji wielkości ziaren. Analiza składu fazowego - dyfrakcja elektronowa z wybranego obszaru (SAD) i nanodyfrakcja, interpretacja dyfraktogramów elektronowych w ujęciu kinematycznym i dynamicznym. Spektroskopia dyspersji energii charakterystycznego promieniowana X (EDX/EDS), metody kwantyfikacji wyników i mapowanie składu. Filtracja energii elektronów – zastosowanie w obrazowaniu i dyfrakcji. Spektroskopia strat energii elektronów (EELS) analiza składu z rozdzielczością chemiczną, obrazowanie spektralne w skali mikro i nano.

W ramach zajęć warsztatowych na wybranych przykładach uczestnicy kursu zostaną przeszkoleni w zakresie sposobu przygotowywania próbek do badań mikroskopowych, zapoznają się z trybami pracy mikroskopu i praktyką wykonywania pomiarów oraz rodzajami uzyskiwanej informacji. Zostaną przeszkoleni w zakresie komputerowego opracowania i analizy wyników, interpretacji obrazów i dyfraktogramów elektronowych w tym z wykorzystaniem technik symulacyjnych oraz w zakresie ilościowej analizy chemicznej (kwantyfikacji danych EDX/EELS).

Literatura:

1. Gryboś, J., Indyka, P., Sojka, Z., (2021) Transmission Electron Microscopy and Elemental Analysis chapter in Metal Oxide Nanoparticles. Formation, Functional Properties and Interfaces,: Morphology, Structure, and Chemical Composition:, Wiley-Blackwell, ISBN 978-1-119-43678-2
2. Carter, C.B. and Williams, D.B. (2016). Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science. Switzerland: Springer International Publishing.
3. Egerton, R.F. (2005). Physical Principles of Electron Microscopy. An Introduction to TEM, SEM and AEM. Springer.
4. Kirkland, E.J. (2010). Advanced Computing in Electron Microscopy. Springer.
5. Egerton, R.F. (2011). Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope. Springer.

Część 2: Mikroskopia AFM i fluorescencyjna (20 h)

Koordynator: prof. dr hab. Szczepan Zapotoczny

Cel: Celem kursu jest uzyskanie przez studenta wiedzy na temat wykorzystania wybranych zaawansowanych mikroskopowych metod badawczych w charakterystyce materiałów oraz nabycie umiejętności preparatyki próbek, wykonywania pomiarów i obróbki wyników dla mikroskopii sił atomowych oraz konfokalnej mikroskopii fluorescencyjnej

Opis: Warsztaty obejmują zagadnienia związane z zaawansowanymi zastosowaniami mikroskopowych technik badawczych na przykładzie mikroskopii sił atomowych (AFM) i fluorescencyjnej mikroskopii konfokalnej W trakcie zajęć zostanie szczegółowo omówiona zasada działania oraz budowa mikroskopu sił atomowych. Na przykładach wybranych próbek z różnych grup materiałowych, studenci realizować będą pomiary mikroskopią sił atomowych, w zaawansowanych trybach pracy, takie jak: badanie topografii powierzchni na powietrzu i w fazie ciekłej, pomiary grubości cienkich warstw organicznych, wyznaczanie modułu elastyczności techniką nanoindentacji, mapowanie przewodnictwa, badanie potencjału powierzchniowego techniką KPFM, obrazowanie próbek biologicznych w roztworach wodnych. Zebrane mikrofotografie AFM, zostaną poddane odpowiedniej obróbce oraz szczegółowej analizie. Zajęcia obejmują również krótkie omówienie zasady działania zaawansowanych trybów pracy mikroskopu fluorescencyjnego i konfokalnego oraz przedstawienie ogólnych sposobów preparatyki próbek do obserwacje metodami mikroskopii optycznej. Na przykładach wybranych próbek studenci realizować będą pomiary w zaawansowanych trybach pracy takich jak: obrazowanie trójwymiarowe oraz pomiary widm fluorescencyjnych mikroobiektów. Przedstawione zostaną metody analizy otrzymanych obrazów mikroskopowych.

Literatura:

1. Voigtländer, B. Atomic Force Microscopy, Springer Nature Switzerland AG 2019, 1-331.
2. Nguyen-Tri, P.; Ghassemi, P.; Carriere, P.; Nanda, S.; Assadi, A.A.; Nguyen, D.D. Recent applications of advanced atomic force microscopy in polymer science: A review. Polymers 2020, 12, 1–28.
3. Jalili, N.; Laxminarayana, K. A review of atomic force microscopy imaging systems: Application to molecular metrology and biological sciences. Mechatronics 2004, 14, 907–945.
4. Howland, R.; Benatar, L.; A practical guide to scanning probe microscopy, Park scientific instruments, 1996, 1-79.
5. Dazzi, A.; Prater, C.B. AFM-IR: Technology and applications in nanoscale infrared spectroscopy and chemical imaging. Chem. Rev. 2017, 117, 5146–5173.
6. Collazo, A.; Bricaud, O.; Desai, K. Use of confocal microscopy in comparative studies of vertebrate morphology. Methods Enzymol. 2005, 395, 521–543.
7. Furrer, P.; Gurny, R. Recent advances in confocal microscopy for studying drug delivery to the eye: Concepts and pharmaceutical applications. Eur. J. Pharm. Biopharm. 2010, 74, 33–40.
8. Chestnut, M.H. Confocal microscopy of colloids. Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 1997, 2, 158–161.
9. Paddock, S.W. Principles and Practices of Laser Scanning Confocal Microscopy. Mol. Biotechnol. 2000, 16, 127–150.
10. Webb, R.H. Confocal optical microscopy: Reports on progress in physics. Rep. Prog. Phys 1996, 59, 427–471.

Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody spektroskopowe
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Spektroskopia EPR (8 h)

Prowadzący: dr hab. P. Pietrzyk, prof. UJ

Cel: Celem zajęć jest zapoznanie studentów z metodologią badań EPR fali ciągłej układów anizotropowych i analizą uzyskanych widm oraz możliwościami badawczymi impulsowej spektroskopii EPR. Możliwości badawcze rodziny technik EPR oraz informacja chemiczna zawarta w widmach zostaną zilustrowane na przykładach najnowszych doniesień literaturowych.

Opis:

1. Rozwinięcie podstaw spektroskopii EPR w metodzie fali ciągłej:
   - anizotropia i symetria widm EPR,
   - widma układów proszkowych,
2. Impulsowa spektroskopia EPR
   - podstawy zjawiska echa spinowego,
   - procesy relaksacji,
   - spektroskopia podpoziomów nadsubtelnych.
3. Zastosowania spektroskopii EPR w badaniach chemicznych i materiałowych – przykłady literaturowe

Literatura:

1. Spektroskopia EPR w chemii i biochemii, M. Symons, PWN (1987)
2. Spektroskopia EPR. Zastosowania w chemii, R. Kirmse, J. Stach, Wyd. UJ, Kraków 1994
3. EPR Spectroscopy: Fundamentals and Methods, D. Goldfarb, S. Stoll (ed.) John Wiley & Sons; (2018)
4. Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy of Inorganic Materials (str. 225-300), P. Pietrzyk, T. Mazur, Z. Sojka, w Local Structural Characterisation: Inorganic Materials Series, John Wiley & Sons (2013)
5. Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy (str. 343-406), P. Pietrzyk, Z. Sojka, E. Giamello, in: Characterization of Solid Materials and Heterogeneous Catalysts - From Structure to Surface Reactivity, Tom 1, Wiley-VCH Verlag (2012)

Część 2: Spektroskopia ramanowska (8 h)

Koordynator: prof. dr hab. M. Barańska; dr hab. K. Małek, prof. UJ

Cel: Zapoznanie studentów z podstawami fizycznymi zaawansowanych metod spektroskopii rozpraszania ramanowskiego pozwalających na analizę obiektów o rozmiarach mikro- i nanoskopowych. Możliwości badawcze technik ramanowskich zostaną zilustrowane na przykładach najnowszych doniesień literaturowych oraz w formie pokazu.

Opis: Panel składa się z 4h wykładu i 2h pokazu jednej z omawianych technik spektroskopii ramanowskiej. Przedstawione będzie obrazowanie ramanowskie, techniki nieliniowe dla szybkiego obrazowania (koherentne antystokesowskie rozpraszanie ramanowskie – CARS i wymuszone rozpraszanie ramanowskie – SRS), plazmonowe wzmocnienie efektu ramanowskiego (wzmocniona powierzchniowa (SERS) i na ostrzu (TERS) spektroskopia ramanowska). Doktoranci poznają zakres stosowania tych technik dla charakterystyki chemicznej nowych materiałów, śledzenia procesów chemicznych, detekcji na poziomie molekularnym.

Literatura:

1. Rozdziały 2, 4.4, 5, 7.13, 7.14 z *Spektroskopia oscylacyjna. Od teorii do praktyki*, K. Małek (red), PWN, Warszawa, 2016.
2. *Stimulated Raman Scattering Microscopy*, Ji-Xin Cheng, Wei Min, Yasuyuki Ozeki, Dario Polli (red), Elsevier, 2021
3. *Confocal Raman Microscopy*, Jan Toporski, Thomas Dieing, Olaf Hollricher (red), Springer Series in Surface Sciences book series (SSSUR, vol.66), 2018
4. *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy,* Sebastian Schlücker, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011

Część 3: Spektroskopia IR (8 h)

Prowadzący: prof. dr hab. K. Góra-Marek

Cel: Zapoznanie doktorantów z nietrywialnym zastosowaniem spektroskopii w podczerwieni

Opis: Tematyka zajęć skupia się wokół zagadnień związanych z badaniami właściwości katalitycznych materiałów porowatych. W kontekście pomiarów IR szybkiego skanowania, obejmujących zjawiska odbywające się w czasowej domenie rzędu 0.2 ms, poruszone pozostaną tematy (i) badań dyfuzji cząsteczek reagentów w materiałach o różnej topologii i rozmiarze kanałów jak i (ii) sposobu oddziaływania cząsteczek o różnych właściwościach (kwasowości/zasadowości/polarności) z centrami sorpcji. Omówione zostaną zagadnienia związane dwuwymiarową spektroskopią korelacyjną IR jak i podstawy pomiarów katalitycznych prowadzonych w modzie operando, tj. sprzężeniu pomiarów spektroskopowych IR z badaniami aktywności katalitycznej.

Literatura:

1. Two-dimensional correlation spectroscopy: applications in vibrational and optical spectroscopy, Isao Noda, Yukihiro Ozaki, John Wiley & Sons – wstęp
2. In Situ and Operando Spectroscopy: A Powerful Approach Towards Understanding Catalysts; Johnson Matthey Technol. Rev., 2018, 62, (3), 316–331
3. Operando IR coupled to SSITKA for photocatalysis: reactivity and mechanistic studies, ACS Catalysis, 12, 2013, 2790-2798

Część 4: Spektroskopia NMR (8 h)

Koordynator: dr B. Musielak

Cel: Zastosowanie spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych małocząsteczkowych związków chemicznych oraz biomolekuł.

Opis: Doktorant w ramach kursu zapozna się z: poprawnym przygotowaniem próbki do rejestracji widm NMR; oprogramowaniem TopSpin – komendy, opracowaniem widm; techniką DEPT i APT,

spektroskopią 2D (COSY, HSQC, HMBC, TOCSY, NOESY, ROESY), metodami badań oddziaływań białko-białko, białko-inhibitor.

Literatura:

1. J. Keeler „Understanding NMR spectroscopy, J. Wiley 2010 http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/
2. H. Gunther, NMR Spectroscopy: Basis Principles, Concepts and Applications in Chemistry, WILEY-VCH Verlag, GmbH&Co. KGaA. Weinheim, Germany, 2013.
3. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kremle, Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych;

Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody badań strukturalnych
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Analiza strukturalna biocząsteczek (12 h)

Koordynator: prof. dr hab. Krzysztof Lewiński

Cel: Zapoznanie doktorantów z analizą strukturalną biocząsteczek.

Opis: Analiza statystyczna konformacji małej cząsteczki oraz oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w krysztale. Analiza trójwymiarowej struktury białka i kieszeni wiążącej ligand. Ocena poprawności i wiarygodności danych strukturalnych makrocząsteczek w aspekcie projektowania ligandów małocząsteczkowych. Przygotowanie struktury białka i ligandów do procedur dokowania. Metody dokowania molekularnego, analiza funkcji oceny i weryfikacja zadokowanych póz. Określenie typów oddziaływań pomiędzy ligandem i aminokwasami kieszeni wiążącej białka – tworzenie dwuwymiarowej mapy oddziaływań ligand-białko (2D ligand plot).

Literatura:

1. S. K. Burley, et al. *RCSB Protein Data Bank: powerful new tools for exploring 3D structures of biological macromolecules for basic and applied research and education in fundamental biology, biomedicine, biotechnology, bioengineering and energy sciences,* Nucleic Acids Research 49: D437–D451, 2021, DOI: 10.1093/nar/gkaa1038
2. I. J. Bruno, J. C. Cole, P. R. Edgington, M. Kessler, C. F. Macrae, P. McCabe, J. Pearson, R. Taylor, *New software for searching the Cambridge Structural Database and visualising crystal structures*, Acta Cryst., B58, 389-397, 2002, DOI: 10.1107/S0108768102003324
3. M. L. Verdonk, J. C. Cole, M. J. Hartshorn, C. W. Murray, R. D. Taylor, *Improved Protein-Ligand Docking Using GOLD,* Proteins, 52, 609-623, 2003, DOI: 10.1002/prot.10465

Część 2: Analiza strukturalna materiałów polikrystalicznych i zabytkowych (12 h)

Koordynator: prof. dr hab. W. Łasocha

Cel: Zaprezentowanie potencjału badawczego metody na bazie problemów materiałowych, badań katalitycznych, oraz badań obiektów zabytkowych.

Opis: Klasyczne zastosowania to jakościowa i ilościowa analiza fazowa oraz wielkość krystalitów.

Wśród nowych zastosowań należy wymienić:

- Dyfrakcja proszkowa w warunkach zmiennych temperatur i ciśnień
- Badania w atmosferach gazów reakcyjnych (zastosowania w katalizie)
- Analiza tekstur (uprzywilejowana orientacja krystalitów)
- Pełne badania strukturalne

Literatura:

1. Shankland, Kenneth, Markvardsen, Anders J. and David, William I. F.. "Powder diffraction based structural studies of pharmaceuticals" *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, vol. 219, no. 12, 2004, pp. 857-865. https://doi.org/10.1524/zkri.219.12.857.55864
2. Altomare, Angela, Caliandro, Rocco, Camalli, Mercedes, Cuocci, Corrado, Giacovazzo, Carmelo, Moliterni, Anna Grazia Giuseppina, Rizzi, Rosanna, Spagna, Riccardo and González-Platas, Javier. "Towards EXPO2005" Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials, vol. 219, no. 12, 2004, pp. 833-837. https://doi.org/10.1524/zkri.219.12.833.55860
3. Favre-Nicolin, Vincent and Černý, Radovan. "A better FOX: using flexible modelling and maximum likelihood to improve direct-space *ab initio* structure determination from powder diffraction" *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, vol. 219, no. 12, 2004, pp. 847-856. https://doi.org/10.1524/zkri.219.12.847.55869
4. David, W. I., Shankland, K., McCusker, L. B., & Baerlocher, C. (Eds.). (2006). Structure determination from powder diffraction data (Vol. 13). OUP Oxford.

Nazwa przedmiotu	Panel: zaawansowane metody analityczne
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Zajęcia będą składały się z 4 niżej wymienionych bloków tematycznych. Każda tematyka będzie przekazywana przez w formie wykładu i seminarium o charakterze pokazowo-warsztatowym (rozmiar czasowy obu części w obrębie będzie zależał od specyfiki poruszanych zagadnień i oczekiwania doktorantów). Ogólnym celem zajęć jest zapoznanie doktorantów z nowoczesnymi zagadnieniami chemii analitycznej i badaniami prowadzonymi w tych obszarach na przykładzie prac prowadzonych w laboratoriach Zakładu

Koordynator: dr hab. Renata Wietecha-Posłuszny

Część 1: Jakość metod analitycznych (8 h)

Prowadzący: J. Kozak, M. Wieczorek, P. Nowak

Cel: Zapoznanie doktorantów z pojęciami dotyczącymi jakości metod analitycznych: walidacją analityczną, modelami kompleksowej oceny jakości metody analitycznej oraz jej zieloności, zasadami zrównoważonego rozwoju, a także zasadami "zielonej" i "białej" chemii analitycznej. Ponadto, celem jest zapoznanie doktorantów z wybranymi przykładami metod analitycznych o wysokiej kompleksowej jakości oraz zgodnych z ideą "zielonej" i "białej" chemii analitycznej.

Opis: W części seminaryjnej zademonstrowany zostanie model kompleksowej oceny metody analitycznej oparty na modelu mieszania barw RGB, w wersji podstawowej oraz dostosowanej do oceny metod w myśl idei "białej" chemii analitycznej. Na przykładzie wybranych metod analitycznych doktoranci nauczą się w praktyce stosować model RGB, co pozwoli im w przyszłości oceniać potencjał ich własnych metod, którymi będą się posługiwać w toku realizacji pracy doktorskiej.

Literatura:

1. E. Bulska, Metrologia Chemiczna, rodz.: 4,7,9, Wydawnictwo Malamut, Warszawa 2008.
2. J. Namieśnik, P. Konieczka, B. Zygmunt, E. Bulska, i in., rodz.: 3,4,8, Ocena i kontrola jakości wyników pomiarów analitycznych, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa, 2007
3. P.M. Nowak, P. Kościelniak, What color is your method? Adaptation of the RGB additive color model to analytical method evaluation, Analytical Chemistry, 91, 2019, 10343-10352, https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b01872
4. P.M. Nowak, R. Wietecha-Posłuszny, J. Pawliszyn, White Analytical Chemistry: An approach to reconcile the principles of Green Analytical Chemistry and functionality, Trends in Analytical Chemistry, 138, 2021, 116223, https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116223

Część 2: Przygotowanie próbek do analizy chemicznej i biochemicznej (8 h)

Prowadzący: K. Madej, R. Wietecha-Posłuszny, M. Król

Cel: Teoretyczne i praktyczne zapoznanie z nowoczesnymi sposobami przygotowania próbek różnorodnych materiałów do analizy chemicznej.

Opis: Przedstawione zostaną podstawy teoretyczne procesu separacji (w tym: opis termodynamiczny, podstawowe mechanizmy rozdzielania i oddziaływania międzycząsteczkowe) oraz omówione zostaną pojęcie lipofilowości i związaną z nią możliwość przewidywania oddziaływań molekularnych, a także zagadnienia związane z nowoczesnymi sposobami wyosobniania analitów (m.in. techniki wymagające specjalistycznej aparatury lub sprzętu laboratoryjnego: MAE, SPME oraz takie, w których podstawową umiejętnością niezbędną do ich wykonania jest pipetowanie: ekstrakcja w punkcie zmętnienia (Cloud Point Extraction, CPE) oraz ekstrakcja szybka (Quick), prosta (Easy), tania (Cheap), efektywna (Effective), elastyczna (Rugged) oraz bezpieczna (Safe), czyli QuEChERS.) z różnorodnych matryc biologicznych i niebiologicznych. Ponadto zaprezentowane zostaną zmodyfikowane sposoby przygotowania matryc biologicznych do analiz nieorganicznych (m.in. zostanie omówiona metoda mineralizacji wspomagana promieniowaniem mikrofalowym z minimalnym zużyciem materiału próbki). Zaprezentowane zostaną możliwości różnych modyfikacji tych technik (np. miniaturyzacji) i ich zastosowania w praktyce analitycznej.

Literatura:

1. L. Ruchomski, QuEChERS – metoda wielopozostałościowa (cz. I), LAB 5, 2020
2. S. Yazdi, *Surfactant-based extraction methods,* Trends in Analytical Chemistry 30(6), 2011, 918-929
3. P. Stepnowski, E. Synak, B. Szafranek, Z. Kaczyński, *Techniki separacyjne*, Wydawnictwo Uniwersytetu Gdańskiego, Gdańsk 2010
4. S. Risticevic, D. Vuckovic, H. Lord, J. Pawliszyn, *Solid-Phase Microextraction*, Elsevier, 2012. doi:10.1016/B978-0-12-381373-2.10055-9
5. A. Wójtowicz, R. Wietecha-Posłuszny, *Contemporary Trends in Drug Analysis of Vitreous Humor: A critical review,* Trends in Analytical Chemistry, 129C (2020) 115935, doi: 10.1016/j.trac.2020.115935

Część 3: Analiza wieloskładnikowa i specjacyjna (8 h)

Prowadzący: M. Woźniakiewicz, A. Woźniakiewicz, A. Telk

Cel: Pokazanie możliwości współczesnych technik sprzężonych (LC-MS, GC-MS, CE-MS, LC-ICP-MS) w analizie wieloskładnikowej i specjacyjnej.

Opis: Obszary zainteresowań analizą specjacyjną i wieloskładnikową (kierunki prowadzonych na świecie badań ilustrowane przykładami, wskazanie na interdyscyplinarność), warsztat pracy z wykorzystaniem technik sprzężonych: prezentacja technik z położeniem nacisku na wielowymiarowość badań, konieczność łączenia wielu technik w celu zapewnienia komplementarności uzyskiwanej wiedzy. Pokaz aparatury w HPLC-ICP-MS, LC-Q-TOF-MS, CE-MS i omówienie wymagań stawianych analizowanym próbkom.

Literatura:

1. C.F. Poole, *The Essence of Chromatography*, Elsevier 2003

2. M.S. Lee, *Mass Spectrometry Handbook*, Wiley 2012
3. H.H. Lauer and G.P. Rozing, *High Performance Capillary Electrophoresis,* Second edition, Agilent Technologies: https://www.agilent.com/cs/library/primers/public/5990-3777EN.pdf
4. Praca zbiorowa pod redakcją W. Żyrnicki, E. Borkowska-Brunecka, E. Bulska i E. Szmyd, *Metody analitycznej spektrometrii atomowej*, MALAMUT, Warszawa 2010.
5. John R. Dean, *Practical Inductively Coupled Plasma Spectroscopy*, Wiley 2005
6. Praca zbiorowa pod redakcją D. Barałkiewicz i E. Bulskiej, *SPECJACJA CHEMICZNA - Problemy i możliwości*, MALAMUT, Warszawa 2009.

Część 4: Czujniki i bioczujniki chemiczne (8 h)

Prowadzący: J. Kochana, P. Knihnicki

Cel: Poznanie podstawowych zagadnień związanych z czujnikami i bioczujnikami.

Opis: Definicja czujnika i bioczujnika, podział (bio)czujników, matryce immobilizujące oraz kompozyty modyfikujące czujniki, immunosensory. Przykłady (bio)czujników i ich zastosowania w diagnostyce medycznej. W części seminaryjnej zaprezentowane zostaną przykładowe materiały funkcjonalne czujników elektrochemicznych.

Literatura:

1. Z. Brzózka, E. Malinowska, W. Wróblewski, *Sensory chemiczne i biosensory*, PWN, Warszawa, 2022
2. P. Gründler, *Chemical Sensors*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Lipsk, 2007 I link – dostęp on line: https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/978-3-540-45743-5.pdf
3. J. Kochana, A. Pollap, M. Madej, rozdział: *Bioczujniki : zasada działania, receptory, detektory* w: Bioanalityka w nauce i życiu, Nowe strategie analityczne i rozwiązania aparaturowe, PWN, Warszawa, 2020.

Nazwa przedmiotu	Panel BioPharma
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Przeciwciała terapeutyczne jako biofarmaceutyki (8 h)

Koordynator: dr Łukasz Skalniak

Cel: Kurs ma na celu zaznajomienie uczestników z unikatowymi właściwościami przeciwciał terapeutycznych i wyjaśnienie fenomenu popularności ich stosowania zarówno w procedurach laboratoryjnych jak i biomedycznych.

Opis: W trakcie kursu (4h – seminarium, 4h - laboratorium) podjęta zostanie tematyka dotycząca biochemicznego charakteru przeciwciał, ich właściwości, naturalnych funkcji biologicznych, produkcji w organizmie oraz produkcji laboratoryjnej, izolacji i oczyszczania, zastosowań laboratoryjnych i medycznych oraz nazewnictwa. W trakcie części praktycznej przeprowadzona zastanie jedna z procedur laboratoryjnych wykorzystująca przeciwciała i obrazująca ich właściwości biochemiczne.

Literatura:

1. *"An Introduction to Medicinal Chemistry"*, Graham L. Patrick, Oxford University Press, ISBN 978-0-19-874969-1

Część 2: Nowe leki – od syntezy do badań klinicznych (8 h)

Koordynator: dr hab. Janusz Dąbrowski, prof. UJ

Cel: W ramach kursu zostanie omówiona droga, jaką musi pokonać związek chemiczny od jej odkrycia, do przysłowiowej apteki. Przedstawione zostaną wybrane badania nad nowymi lekami, zarówno te natury podstawowej, jak również elementy badań przedklinicznych i klinicznych. Kurs umożliwi również zrozumienie w jaki sposób budowa chemiczna związków biologicznie czynnych determinuje ich właściwości fizykochemiczne oraz farmakologiczne oraz w jaki sposób ich dalsza modyfikacja może przyczynić się do ich zastosowana w medycynie. Ponadto kurs ma na celu dostarczenie podstaw doświadczalnych w zakresie wykorzystania różnorodnych technik badawczych w celu wyznaczania podstawowych parametrów farmakologicznych oraz aktywności biologicznej.

Opis: Źródłem nowych leków są związki chemiczne znajdujące się w roślinach, organizmach zwierząt, lecz największą rolę w procesie odkrywania i rozwoju leków ma synteza nowych związków chemicznych o ulepszonych właściwościach fizykochemicznych i farmakologicznych oraz pożądanym działaniu biologicznym, które można zastosować w leczeniu lub zapobieganiu chorobom. Substancje modyfikuje się poprzez podstawienie do niej różnych grup chemicznych lub jonów metali, uzyskując kilka wariantów o korzystniejszych właściwościach w porównaniu z lekiem macierzystym. W ramach wykładu uczestnicy kursu zapoznają się z przykładami badań podstawowych, przedklinicznych i klinicznych. Przeanalizowany zostanie proces badań

naukowych, jakiemu muszą zostać poddane potencjalne leki zanim dojdzie do prób klinicznych. Omówione zostaną modele komórkowe, tkankowe i zwierzęce w praktyce przedklinicznej. W ramach warsztatów zostaną wyznaczone podstawowe parametry farmakologiczne (np. współczynnik podziału oktanol/woda, połówkowy czas trwania) oraz właściwości biologiczne (cytotoksyczność, akumulacja w komórkach) potencjalnych leków.

Literatura:

1. J.M. Dąbrowski, *Advances in Inorganic Chemistry* (2017) 70, 343-394.
2. B. Pucelik, A. Sułek, J.M. Dąbrowski, *Coord. Chem. Rev.* (2020) 416, 213340.
3. B. Pucelik, A. Sułek, A. Barzowska, J.M. Dąbrowski *Cancer Letters* (2020) 492, 116-135.

Część 3: **Biospektroskopia ramanowska (8 h)**

Koordynator: prof. dr hab. M. Barańska; dr hab. K. Małek, prof. UJ

Cel: Zapoznanie studentów z metodologią badań ramanowskich próbek biologicznych i analizą danych spektroskopowych. Przedstawienie konfokalnego obrazowania ramanowskiego wspieranego mikroskopią sił atomowych (AFM), mikroskopią bliskiego pola (SNOM) oraz mikroskopią fluorescencyjną jako nowoczesnego podejścia spektroskopowej analizy próbek biologicznych.

Opis: Panel składa się z 6h wykładu i 2h pokazu jednej z omawianych technik spektroskopii ramanowskiej. Omówione zostanie obrazowanie ramanowskie oraz plazmonowe wzmocnienie efektu ramanowskiego (wzmocniona powierzchniowa (SERS) i na ostrzu (TERS) spektroskopia ramanowska) oraz sprzężenie tych technik z optycznym mikroskopem konfokalnym czy mikroskopiami bliskiego pola (AFM, SNOM). Przedstawione zostaną także Ramanowska Aktywność Optyczna (ROA) w połączeniu z Dichroizmem Kołowym (CD) jako alternatywne podejście w analizie próbek chiralnych oraz polimorfizmu. Doktoranci poznają przykłady stosowania tych technik w analizie próbek biologicznych, medycznych i farmaceutycznych. W części pokazowej panelu zapoznają się z praktycznymi aspektami pracy z materiałem biologicznym podczas pomiarów konfokalnego pomiaru ramanowskiego oraz obrazowania AFM komórek.

Literatura:

1. Rozdziały 2, 4.4, 5, 7.13, 7.14 z *Spektroskopia oscylacyjna. Od teorii do praktyki*, K. Małek (red), PWN, Warszawa, 2016.
2. *Mikroskopia Sił Atomowych w analizie komórek* - materiały będą dostarczone przez prowadzącego.
3. *Confocal Raman Microscopy*, Jan Toporski, Thomas Dieing, Olaf Hollricher (red), Springer Series in Surface Sciences book series (SSSUR, vol.66), 2018
4. *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy,* Sebastian Schlücker, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011

Nazwa przedmiotu	Panel: technologia i chemia środowiska
Jednostka:	Wydział Chemii
Punkty ECTS	2
Liczba godzin	24
Język prowadzenia	polski
Typ zajęć	warsztat
Zaliczenie	zaliczenie na ocenę

Część 1: Synteza chemiczna w skali technicznej (8 h)

Koordynator: prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski

Cel: W ramach warsztatów doktoranci zapoznają się z możliwościami i ograniczeniami przeskalowania syntezy chemicznej do skali technicznej.

Opis: Zajęcia o charakterze pokazowo-dyskusyjnym oparte na analizie typowych procesów realizowanych w przemyśle chemicznym. Na wybranych przykładach przedstawione zostaną techniki reaktorowe, jak również urządzenia do operacji jednostkowych wykorzystywane w skali przemysłowej. Doktoranci zapoznają się między innymi ze specyfiką technologii oraz funkcjonowaniem instalacji do otrzymywania gazu syntezowego, amoniaku i kwasu azotowego(V), nawozów azotowych, prowadzenia procesów polimeryzacji czy otrzymywania materiałów w ilościach kilogramowych.

Literatura:

1. Jacob A. Moulijn, Michiel Makkee, Annelies Van Diepen, "Chemical Process Technology", John Wiley & Sons, 2013
2. Andreas Jess, Peter Wasserscheid, "Chemical Technology: From Principles to Products", Wiley-VCH, 2020
3. Krzysztof Schmidt-Szałowski, Mikołaj Szafran, Ewa Bobryk, Jan Sentek, "Technologia chemiczna", Wydawnictwo Naukowe PWN, 2013

Część 2: Wyzwania zrównoważonej chemii (8 h)

Koordynator: Katarzyna Hąc-Wydro

Cel: Przedstawienie, na wybranych przykładach, znaczenia nauk chemicznych w działaniach na rzecz ochrony środowiska i zrównoważonego rozwoju.

Opis:
Wykład (2h): Zrównoważony rozwój, Europejski zielony ład, działania i wyzwania na rzecz ochrony środowiska i zrównoważonego rozwoju na przykładzie Europejskiej strategii na rzecz tworzyw sztucznych, strategii od pola do stołu, ustawy o kosmetykach; Zrównoważona chemia – kierunki badań w dziedzinie chemii na rzecz ochrony środowiska i zrównoważonego rozwoju, ich znaczenie i wybrane osiągnięcia (monitoring środowiska i analityka środowiskowa, nowe metody usuwania szkodliwych substancji z różnych elementów środowiska, metody ograniczania emisji szkodliwych substancji do środowiska).

Warsztaty (6h): 1. (3h) Przygotowanie modeli lipidowych membran i wykorzystanie ich do zilustrowania toksycznego wpływu substancji emitowanych z plastiku (np. bisfenolu) na układy

biologiczne. 2. (3h) Oznaczanie metali ciężki w kosmetykach kolorowych – analiza i interpretacja wyników w odniesieniu do obowiązujących rozwiązań prawnych.

Literatura:

1. M. Burchard-Dziubińska et al. *Zrównoważony rozwój – naturalny wybór*, rozdz. 1, wydawnictwo UŁ, 2014 (dostępna online)
2. Ch. Blum, et al, *The concept of sustainable chemistry: Key drivers for the transition towards sustainable development, Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 5 (2017) 94- 104
3. P. Marion et al., *Sustainable chemistry: how to produce better and more from less?* Green Chem., 19 (2017) 4973

Część 3: Zrównoważone technologie magazynów energii Li-ion (8 h)

Koordynator: dr hab. Marcin Molenda, prof. UJ

Cel: Uczestnicy zapoznają się z praktycznymi aspektami projektowania, powiększania skali i elementami procesu wdrożeniowego zrównoważonych technologii materiałowych stosowanych w magazynach energii elektrycznej opartych na technologii akumulatorów Li-ion w dobie zachodzącej zielonej transformacji energetycznej.

Opis: Zajęcia warsztatowe (wykład oraz zajęcia praktyczne prowadzone w formule "case study"). Omówione zostaną zasady zielonej chemii projektowania zrównoważonych technologii materiałowych obejmujących całość łańcucha wartości produktu: surowce-przetwórstwo-zastosowanie-zagospodarowanie-recykling z uwzględnieniem aspektu oddziaływania na środowisko (ślad węglowy), efektywności energetycznej i ekonomii oraz obowiązujących regulacji. Proces powiększania skali (scale-up) technologii oraz elementy procesu wdrożeniowego zostaną przedstawione na wybranym przykładzie technologii materiału aktywnego (katoda lub anaoda). W ramach zajęć praktycznych „case study" uczestnicy przeprowadzą proces syntezy materiału aktywnego do ogniw Li-ion w skali półtechnicznej ~1 kg, dla którego wykonają bilans materiałowy i energetyczny. Uzyskany produkt posłuży do budowy demonstratorów ogniw Li-ion i ich walidacji elektrochemicznej.

Literatura:

1. M. Yoshio, R. Brodd, A. Kozawa: Lithium-Ion Batteries, Springer, 2009
2. A. Czerwiński: Akumulatory, baterie, ogniwa, WKŁ, 2005
3. FCAB National Blueprint Lithium Batteries. https://www.energy.gov/sites/default/files/2021-06/FCAB%20National%20Blueprint%20Lithium%20Batteries%200621_0.pdf
4. Batteries Europe: Strategic Research Agenda for batteries 2020. https://ec.europa.eu/energy/sites/default/files/documents/batteries_europe_strategic_research_agenda_december_2020__1.pdf