

1. Właściwości gazów

- 1.1. Gaz doskonały: zmienne stanu, równania stanu
- 1.2. Model kinetyczny gazów: zderzenia, gazy rzeczywiste, odchylenia od zachowania gazu doskonałego, równanie van der Waalsa

2. Pierwsza zasada termodynamiki

- 2.1. Energia wewnętrzna: praca, ciepło i energia, definicja energii wewnętrznej, praca objętościowa, przemiany cieplne
- 2.2. Entalpia: definicja, zależność entalpii od temperatury
- 2.3. Termochemia: zmiany entalpii standardowej, standardowe entalpie tworzenia, zależność entalpii reakcji od temperatury, techniki eksperymentalne
- 2.4. Funkcje stanu i różniczki zupełne: różniczki zupełne i niezupełne, zmiany energii wewnętrznej, zmiany entalpii, efekt Joule'a-Thomsona
- 2.5. Przemiany adiabatyczne: miana temperatury i ciśnienia

3. Druga i trzecia zasada termodynamiki

- 3.1. Entropia: druga zasada termodynamiki, definicja entropii, entropia jako funkcja stanu; zmiany entropii towarzyszące wybranym procesom (rozprężanie, przemiany fazowe, ogrzewanie), procesy złożone, wyznaczanie entropii, trzecia zasada termodynamiki
- 3.2. Termodynamika układu: energia swobodna i entalpia swobodna, standardowa entalpia swobodna reakcji
- 3.3. Połączenie pierwszej i drugiej zasady termodynamiki: właściwości energii wewnętrznej i entalpii swobodnej

4. Przemiany fizyczne substancji czystych

- 4.1. Diagramy fazowe substancji czystych: trwałość faz, linie równowag faz, typowe diagramy fazowe
- 4.2. Termodynamiczne aspekty przemian fazowych: wpływ warunków na trwałość faz, położenie linii równowag faz

5. Mieszanki proste

- 5.1. Termodynamiczny opis mieszanin: cząstkowe wielkości molowe, termodynamika mieszania, potencjały chemiczne cieczy,
- 5.2. Właściwości roztworów: mieszaniny ciekłe, wielkości koligatywne
- 5.3. Diagramy fazowe układów dwuskładnikowych: ciecze (diagramy prężności par, diagramy fazowe temperatura-skład, destylacja, diagramy fazowe ciecz-ciecz); ciała stałe (eutektyki, układy, w których przebiega reakcja, topnienie niekongruentne)
- 5.4. Diagramy fazowe układów trójskładnikowych: trójkątne diagramy fazowe, układy trójskładnikowe
- 5.5. Aktywności: rozpuszczalnika, substancji rozpuszczonej, roztworów regularnych, jonów (średnie współczynniki aktywności, teoria Debye'a-Hückla)

6. Równowaga chemiczna

- 6.1. Stała równowagi: minimum entalpii swobodnej, opis równowagi chemicznej
- 6.2. Wpływ warunków zewnętrznych na stan równowagi: wpływ ciśnienia i temperatury
- 6.3. Ogniwa elektrochemiczne: równania połówkowe i elektrody, rodzaje ogniw, potencjał ogniwa, wyznaczanie funkcji termodynamicznych
- 6.4. Potencjały elektrod: potencjały standardowe, zastosowanie potencjałów standardowych

7. Teoria kwantów

- 7.1. Kwantowanie energii: promieniowanie ciała doskonale czarnego, pojemność cieplna, widma atomowe i cząsteczkowe, Dualizm korpuskularno-falowy: korpuskularny charakter promieniowania elektromagnetycznego, falowy charakter cząstek
- 7.2. Funkcje falowe: równanie Schrödingera, interpretacja Borna funkcji falowej (normalizacja funkcji falowej, ograniczenia funkcji falowej, kwantowanie)
- 7.3. Operatory i obserwabla: operatory (równania własne, konstruowanie operatorów, operatory hermitowskie, ortogonalność), superpozycje i wartości oczekiwane, zasada nieoznaczoności, postulaty mechaniki kwantowej
- 7.4. Ruch translacyjny: swobodny ruch w jednym wymiarze, ruch w ograniczonej przestrzeni jednowymiarowej (rozwiązania dopuszczalne, właściwości funkcji falowych, właściwości energii, ruch w ograniczonej przestrzeni dwu- i trójwymiarowej (poziomy energetyczne i funkcje falowe, degeneracja, tunelowanie)
- 7.5. Ruch oscylacyjny: oscylator harmoniczny (poziomy energetyczne, funkcje falowe) właściwości oscylatora harmonicznego (wartości średnie, tunelowanie)
- 7.6. Ruch rotacyjny: rotacja w dwóch wymiarach (rozwiązanie równania Schrödingera, kwantowanie momentu pędu), rotacja w trzech wymiarach (funkcje falowe i poziomy energetyczne, moment pędu, model wektorowy)

8. Struktura atomów i widma atomowe

- 8.1. Atomy wodoropodobne: struktura atomów wodoropodobnych (rozdzielanie zmiennych, rozwiązania równania radialnego), orbitale atomowe i ich energie
- 8.2. Atomy wieloelektronowe: przybliżenie orbitalne, zakaz Pauliego, zasada rozbudowy powłok elektronowych (przenikanie i ekranowanie, reguły Hunda, promienie atomów i jonów, energie jonizacji i powinowactwa elektronowe), orbitale pola samouzgodnionego
- 8.3. Widma atomowe atomów wodoropodobnych i atomów wieloelektronowych (termy singletowe i trypletowe, sprzężenie spinowo-orbitalne, symbole termów, reguły Hunda, reguły wyboru)

9. Struktura cząsteczek

- 9.1. Przybliżenie Borna-Oppenheimera,
- 9.2. Teoria wiązań walencyjnych, cząsteczki dwuatomowe, rezonans, cząsteczki wieloatomowe (promocja, hybrydyzacja)
- 9.3. Teoria orbitali molekularnych: zjonizowana cząsteczka wodoru, liniowa kombinacja orbitali atomowych (konstruowanie kombinacji liniowych, orbitale wiążące i antywiążące, oznaczenia orbitali)
- 9.4. Teoria orbitali molekularnych: dwuatomowe cząsteczki homojądrowe, konfiguracje elektronowe (orbitale σ i π , całka nakładania, cząsteczki dwuatomowe pierwiastków drugiego okresu), spektroskopia fotoelektronów
- 9.5. Teoria orbitali molekularnych: dwuatomowe cząsteczki heterojądrowe, wiązanie polarne i elektroujemność, zasada wariacyjna (procedura, charakterystyka rozwiązań)
- 9.6. Teoria orbitali molekularnych: cząsteczki wieloatomowe, przybliżenie Hückla (wstępny opis metody, macierzowe sformułowanie metody, zastosowania (energia wiązania π -elektronowego, trwałość układów aromatycznych), chemia komputerowa (metody pół-empiryczne i metody ab initio, teoria funkcjonału gęstości, graficzna reprezentacja cząsteczek)

10. Symetria cząsteczek

- 10.1. Kształt i symetria: operacje symetrii i elementy symetrii, klasyfikacja cząsteczek ze względu na symetrię, bezpośrednie konsekwencje symetrii (polarność i chiralność)
- 10.2. Zastosowania symetrii: zerowanie się całek, zastosowanie w teorii orbitali molekularnych, reguły wyboru

11. Spektroskopia molekularna

- 11.1. Podstawy spektroskopii molekularnej: absorpcja i emisja promieniowania, szerokość linii widmowej, techniki eksperymentalne
- 11.2. Spektroskopia rotacyjna: poziomy energii rotacyjnej, spektroskopia mikrofalowa, rotacyjna spektroskopia ramanowska, statystyka jądrowa i stany rotacyjne
- 11.3. Spektroskopia oscylacyjna cząsteczek dwuatomowych: ruch oscylacyjny, spektroskopia w podczerwieni, anharmoniczność, widma rotacyjno-oscyłacyjne, ramanowskie widma oscylacyjne
- 11.4. Spektroskopia oscylacyjna cząsteczek wieloatomowych: drgania normalne, absorpcyjne widma w podczerwieni, Ramanowskie widma oscylacyjne
- 11.5. Analiza symetrii przejść oscylacyjnych: klasyfikacja drgań normalnych zgodnie z ich symetrią, symetria oscylacyjnych funkcji falowych
- 11.6. Widma elektronowe cząsteczek dwu- i wieloatomowych
- 11.7. Dezaktywacja stanów wzbudzonych: fluorescencja i fosforescencja, dysocjacja i predysocjacja, lasery

12. Rezonans magnetyczny

- 12.1. Ogólne zasady: jądrowy rezonans magnetyczny, elektronowy rezonans paramagnetyczny
- 12.2. Cechy widm NMR: przesunięcie chemiczne, czynniki wpływające na stałą ekranowania, struktura subtelna, procesy wymiany, NMR substancji stałych
- 12.3. Techniki impulsowe w NMR: wektor namagnesowania, relaksacja spinowa, rozprężanie spinów, jądrowy efekt Overhausera
- 12.4. Elektronowy rezonans paramagnetyczny: czynnik g, struktura nadsubtelna widma EPR

13. Termodynamika statystyczna

- 13.1. Rozkład Boltzmanna: stany makro układu i prawdopodobieństwo termodynamiczne, względne obsadzenie stanów
- 13.2. Cząsteczkowe funkcje rozdziału: znaczenie i składowe funkcje rozdziału
- 13.3. Energie cząsteczek: podstawowe równania, udziały poszczególnych rodzajów ruchu
- 13.4. Zespół kanoniczny: pojęcie zespołu, średnia energia układu, cząsteczki nieoddziałujące ze sobą, zależność energii od objętości
- 13.5. Energia wewnętrzna i entropia oraz pochodne funkcje termodynamiczne

14. Oddziaływania międzycząsteczkowe

- 14.1. Elektryczne właściwości cząsteczek: elektryczny moment dipolowy, polaryzowalność, polaryzacja
- 14.2. Oddziaływania międzycząsteczkowe: oddziaływania między dipolami, wiązanie wodorowe, oddziaływanie całkowite
- 14.3. Ciecze: oddziaływania cząsteczkowe w cieczach, granica faz ciecz-para, filmy powierzchniowe, kondensacja
- 14.4. Makrocząsteczki: średnie masy molowe, różne poziomy struktury makrocząsteczek, kłębki statystyczne, właściwości mechaniczne, właściwości termiczne
- 14.5. Samoorganizujące się układy: koloidy, micelle i błony biologiczne

15. Ciała stałe

- 15.1. Struktura kryształu: sieci krystaliczne, oznaczenia płaszczyzn sieciowych
- 15.2. Metody dyfrakcyjne: rentgenografia strukturalna, dyfrakcja neutronów i elektronów
- 15.3. Wiązania w ciałach stałych: metale, kryształy jonowe, kryształy kowalencyjne i molekularne
- 15.4. Właściwości elektryczne ciał stałych: przewodniki metaliczne, izolatory i półprzewodniki, nadprzewodniki
- 15.5. Właściwości magnetyczne ciał stałych: podatność magnetyczna, trwałe i indukowane momenty magnetyczne, magnetyczne właściwości nadprzewodników

16. Cząsteczki w ruchu

- 16.1. Wielkości transportowe gazu doskonałego: równania fenomenologiczne, parametry transportu
- 16.2. Ruch cząsteczek w cieczach, dyfuzja (ujęcie termodynamiczne, równanie dyfuzji, opis statystyczny)

17. Kinetyka chemiczna

- 17.1. Szybkość reakcji chemicznych: monitorowanie postępu reakcji, szybkości reakcji
- 17.2. Scałkowane równania kinetyczne: reakcje zerowego, pierwszego i drugiego rzędu
- 17.3. Reakcje bliskie stanu równowagi: reakcje pierwszego rzędu bliskie stanu równowagi
- 17.4. Równanie Arrheniusa: zależność szybkości reakcji od temperatury, interpretacja parametrów równania Arrheniusa
- 17.5. Mechanizmy reakcji: reakcje elementarne, następcze reakcje elementarne, przybliżenie stanu stacjonarnego, etap limitujący szybkość reakcji, równowagi wstępne, kinetyczna i termodynamiczna kontrola reakcji
- 17.6. Przykłady mechanizmów reakcji: reakcje jednocząsteczkowe, kinetyka polimeryzacji, reakcje katalizowane enzymatycznie
- 17.7. Fotochemia: procesy fotochemiczne, wydajność kwantowa procesu pierwotnego, mechanizm dezaktywacji wzbudzonego stanu singletowego, wygaszanie, rezonansowe przeniesienie energii

18. Dynamika reakcji

- 18.1. Teoria zderzeń: zderzenia aktywne, model Rice'a-Ramspergera-Kassela
- 18.2. Reakcje kontrolowane przez dyfuzję: reakcje w roztworze, równanie bilansu materiałowego
- 18.3. Teoria stanu przejściowego: równanie Eyringa, aspekty termodynamiczne, kinetyczny efekt izotopowy

19. Procesy zachodzące na powierzchniach ciał stałych

- 19.1. Wzrost powierzchni, adsorpcja fizyczna i chemiczna, techniki eksperymentalne
- 19.2. Adsorpcja i desorpcja: izotermy adsorpcji, szybkość adsorpcji i desorpcji
- 19.3. Kataliza heterogeniczna: mechanizmy katalizy heterogenicznej, aktywność katalityczna powierzchni
- 19.4. Procesy elektrodowe: granica faz elektroda-roztwór, gęstość prądu elektrodowego, woltamperometria, elektroliza, pracujące ogniwa galwaniczne