

## Pytania specjalizacyjne do dyplomowego egzaminu magisterskiego

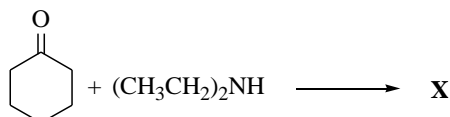
Pulę pytań specjalizacyjnych na egzamin magisterski podzielono na tzw. koszyki i są to:

1. Chemia organiczna
2. Chemia ogólna i nieorganiczna
3. Chemia analityczna i środowiska
4. Chemia fizyczna
5. Chemia teoretyczna
6. Krystalografia
7. Technologia chemiczna i chemia materiałowa
8. Dydaktyka chemii

Liczba pytań w każdym koszyku ustalona została na 40 i z takiej liczby pytań student losuje dwa pytania podczas egzaminów, które odbywają się w poszczególnych Katedrach.

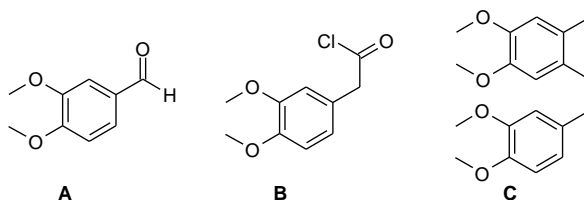
### Chemia organiczna 1

1. Proszę narysować wszystkie izomery 1,2-dichlorocyklopropanu i wskazać relacje stereochemiczne między nimi.
2. Jakie proste reakcje chemiczne pozwolą na wizualne odróżnienie:
  - a. butanonu od butanolu
  - b. cykloheksanu od cykloheksenu
  - c. fenolu od cykloheksanolu
3. Jakie proste reakcje chemiczne pozwolą na wizualne odróżnienie:
  - a. chlorku benzylu od chlorobenzenu
  - b. kwasu butanowego od amidu kwasu butanowego
  - c. benzyloaminy od aniliny
4. Proszę zaproponować przynajmniej trzy metody rozdziału mieszaniny nitrobenzenu (t.w.=210°C) i aniliny (t.w.= 184°C).
5. Proszę zaproponować przynajmniej trzy metody rozdziału mieszaniny nitrobenzenu (t.w.=210°C) i kwasu benzoowego (t.t.= 123°C).
6. Proszę rozważyć następującą reakcję:



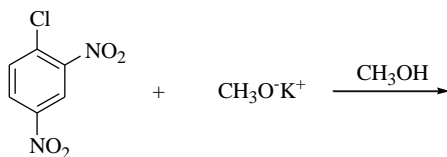
Jaki jest wzór głównego produktu **X** tej przemiany?

7. Proszę zaproponować sekwencję przemian (nie więcej niż 3 etapy), która pozwoli ze związków **A** i **B** (jedyne źródła atomów węgla) otrzymać związek **C**.

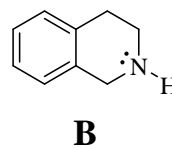
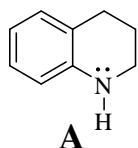


8. Proszę zaproponować metody identyfikacji aniliny.

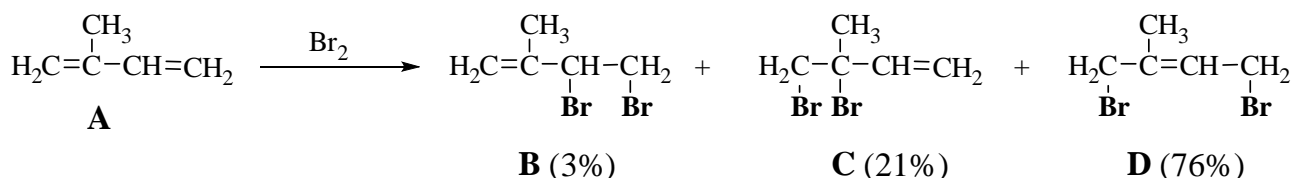
9. Proszę zaproponować metody identyfikacji etanolu.
10. Który ze związków: propanon czy propanal jest bardziej reaktywny w reakcji addycji nukleofilowej? Proszę uzasadnić odpowiedź.
11. Proszę uzupełnić poniższe równanie. Proszę podać nazwy organicznych substratów i produktów tej przemiany oraz nazwać tę reakcję.



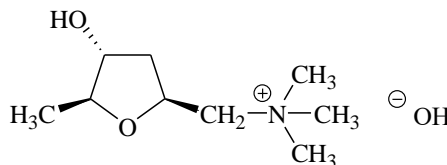
12. Proszę narysować wzory strukturalne następujących związków i uporządkować je wg rosnących właściwości zasadowych: benzyloamina, anilina, *o*-nitroanilina, *o*-toluidyna oraz uzasadnić odpowiedź.
13. Która z poniższych amin: **A** (*tetrahydrochinolina*) czy **B** (*tetrahydroizochinolina*) ma silniejsze właściwości zasadowe? Wybór proszę uzasadnić.



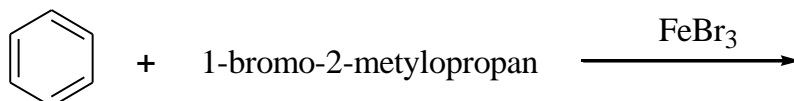
14. Addycja elektrofilowa Br<sub>2</sub> do izoprenu (**A**) prowadzi do powstania mieszaniny produktów. **B**, **C** i **D**. Proszę wyjaśnić dlaczego, spośród adduktów-1,2 związek **C** przeważa nad jego izomerami. Proszę podać nazwy systematyczne związków **A**, **B**, **C** i **D**.



15. Proszę napisać równanie reakcji 2,3-dimetylobutan-2-olu ze stężonym roztworem kwasu solnego. Proszę przedstawić i nazwać mechanizm tej reakcji.
16. Proszę wyjaśnić dlaczego w warunkach standardowych (T=298 K, p=1000 hPa) etanol jest cieczą, a jego izomer eter dimetylowy jest gazem?
17. *Muskaryna* jest trującym alkaloidem wielu grzybów m.in. muchomora czerwonego. Proszę wskazać centra stereogeniczne w cząsteczce tego związku i przypisać im konfigurację *R* lub *S*.



18. Proszę narysować wzory strukturalne następujących związków i uporządkować je wg malejącej reaktywności w reakcji aromatycznej substytucji elektrofilowej: pirydyna, benzen, toluen, anilina oraz uzasadnić odpowiedź.
19. Proszę narysować główny produkt poniższej przemiany, podać jego nazwę oraz nazwę tej reakcji.



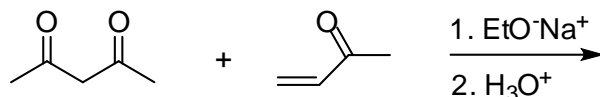
20. Proszę narysować wzory strukturalne produktów, które mogą powstać w reakcji 1-metylocykloheksenu z następującymi odczynnikami:

a) wodny kwaśny roztwór KMnO

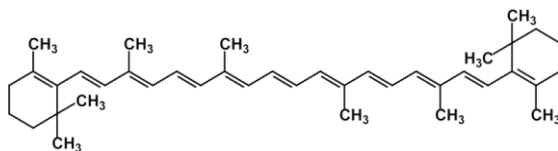
b) O<sub>3</sub>, następnie Zn, CH<sub>3</sub>COOH

### Chemia organiczna 2

1. Opisz tautomerię związków karbonylowych.
2. Napisz mechanizm i zastosowanie w syntezie organicznej kondensacji estrowej Claisena.
3. Jaki produkt powstanie w poniższej reakcji? Jak nazywa się ta reakcja?



4. Podaj przykłady wykorzystania acetylooctanu etylu i malonianu dimetylu w syntezie organicznej.
5. Napisz wzory furanu, tiofenu i pirolu. Dla jednego z nich napisz reakcję otrzymywania.
6. Proszę porównać strukturę oraz właściwości chemiczne pirydyny i pirolu.
7. Wyjaśnij, dlaczego pirydyna jest mocniejszą zasadą niż pirol.
8. Proszę porównać zasadowość pirydyny z zasadowością 4-metoksypirydyny i 4-acetylopirydyny.
9. Napisz, co najmniej 3 reakcje (metody) otrzymywania fenyloalaniny.
10. Ile tripeptydów można otrzymać z dwóch aminokwasów takich jak alanina i glicyna? Przedstawić racjonalną metodę syntezy tripeptydu Ala-Gly-Ala.
11. Jakie są sposoby blokowania grup funkcyjnych w aminokwasach. (zapisz odpowiednie reakcje dla fenyloalaniny).
12. Jakie produkty powstaną w reakcji L-alaniny z (zapisz równania reakcji):
  - a) CH<sub>3</sub>OH / H<sup>+</sup>
  - b) Węglan di-*t*-butylu - (t-BuOC=O)<sub>2</sub>O
  - c) N-Boc-glicyną
13. Zapisz wzór strukturalny D-glukozy i omów zjawisko mutarotacji.
14. Jak wyjaśnić fakt, że D-fruktoza zachowuje się jak cukier redukujący (np. w reakcji z odczynnikiem Tollensa). Napisz odpowiednie równania reakcji.
15. Czym się różni (pod względem chemicznym) DNA od RNA. Zapisz wzorami po jednym przykładzie nukleotydu.
16. Z jakich elementów składa się nukleotyd. Napisz wzór nukleotydu dla adeniny.
17. Z ilu jednostek izoprenowych składa się β-karoten o poniższym wzorze. Uzasadnij odpowiedź.



18. Narysuj diagram orbitali molekularnych sprzężonego dienu (1,3-butadienu). Zaznacz HOMO i LUMO zarówno w stanie podstawowym jak i wzbudzonym.
19. Na przykładzie elektrocyklizacji dla 1,3-butadienu, opisz ten proces i wyjaśnij pojęcia zamknięcie konrotacyjne i dysrotacyjne.
20. Napisz wynik reakcji 1,3-butadienu z maleinianem dimetylu uwzględniając stereochemię produktu.

## Chemia ogólna i nieorganiczna

1. Jakie znaczenie dla współczesnej teorii budowy atomu mają: a) postulat de Broglie'a, b) zasada nieoznaczoności Heisenberga.
2. Omów podstawowe założenia teorii orbitali molekularnych. Narysuj diagram orbitalny cząsteczki tlenu.
3. Za pomocą metody orbitali molekularnych wykaż że mogą istnieć cząsteczki (jony):  $O_2^{2+}$ , NO,  $N_2$ . Oblicz dla każdej z nich rząd wiązania i określ jej właściwości magnetyczne. Czy jon  $N_2^+$  będzie trwalszy od cząsteczki  $N_2$ ? (Odpowiedź uzasadnij)
4. Wyjaśnij dlaczego wapń ma tylko nieznacznie wyższy (bardziej dodatni) od potasu potencjał normalny, mimo że suma I i II energii jonizacji wapnia jest o wiele wyższa od energii jonizacji potasu.
5. Wyjaśnij dlaczego lit, mimo najwyższej w I grupie energii jonizacji, ma najniższy potencjał normalny.
6. Wyjaśnij dlaczego chlorek glinu, mimo występującego w nim wiązania kowalencyjnego spolaryzowanego, w roztworze wodnym jest całkowicie zdysocjowany na jony.
7. Dlaczego azot jest tak mało reaktywny?
8. Narysuj cząsteczkę  $B_2H_6$ . Opisz rodzaje wiązań występujące w tej cząsteczce.
9. Podaj definicje elektroujemności. Jakie znasz jej skale? Jakie są zasadnicze różnice pomiędzy nimi?
10. Porównaj pojęcie kwasu (zasady) w teoriach Bronsteda i Lewisa.
11. Jak zmienia się moc kwasów beztlenowych HX w układzie okresowym (X-atom chlorowca)?
12. Na czym polega półprzewodnictwo? Wyjaśnij to zjawisko na gruncie teorii pasmowej.
13. Co to jest energia sieci związku jonowego? Jak można ją obliczyć?
14. Co to jest kontrakcja lantanowcowa? Jak można wyjaśnić ten efekt?
15. Na czym z termodynamicznego, a na czym z kinetycznego punktu widzenia, polega stan równowagi reakcji. Jaki związek ma stała równowagi reakcji ze standardową zmianą swobodnej entalpii tej reakcji?
16. Metody otrzymywania pierwiastków ultra czystych.
17. Opisz na czym polega proces elektrorafinacji miedzi.
18. Jakie zalety (w porównaniu ze stalą) ma tytan jako materiał konstrukcyjny? Dlaczego nie wyparł do tej pory stali w powszechnych zastosowaniach?
19. Wyłutnierz różnicę pomiędzy trwałością a biernością kompleksów.
20. Omów dwa ogólne mechanizmy reakcji przeniesienia elektronów w kompleksach.
21. Scharakteryzuj główne mechanizmy wymiany ligandów w kompleksach.
22. W eterze koronowym zastąpiono dwa atomy tlenu atomami siarki. Czy będzie on tworzył trwalsze kompleksy z jonami sodu  $Na^+$  czy srebra  $Ag^+$ ? Odpowiedź uzasadnij.
23. Związki chemiczne tworzone przez gazy szlachetne.
24. Jakie warunki muszą być spełnione aby powstał kompleks o kwadratowej symetrii pola?
25. Co to jest energia stabilizacji w polu krystalicznym? Jaki związek ma ta wielkość z trwałością kompleksu? Czy znasz jakieś dowody eksperymentalne wykazujące taki związek?
26. Jakich rodzajów izomerii można się spodziewać dla jonu  $[Co(en)_2Cl_2]^+$ ? (en- etylenodiamina, 1,2-diaminoetan).
27. Jak wygląda tworzenie wiązań typu  $\pi$  z udziałem atomu centralnego w związku kompleksowym?

28. Co to jest efekt chelatowy? Wyjaśnij jego źródła.
29. Co to jest efekt makrocykliczny? Jakie jest jego źródło?
30. Stabilizacja niestandardowo niskich stopni utleniania metali w kompleksach.
31. Stabilizacja niestandardowo wysokich stopni utleniania w związkach kompleksowych.
32. Podaj kryteria doboru elektrolitu podstawowego w pomiarach elektrochemicznych.
33. Co to jest podwójna warstwa elektryczna? Omów jej budowę.
34. Ogniw paliwowe. Zasada działania. Perspektywy rozwoju.
35. Opisz zasadę działania, znanych Ci, współczesnych ogniw do zasilania urządzeń przenośnych. Które z tych rozwiązań jest Twoim zdaniem najlepsze? (Odpowiedź uzasadnij).
36. Korozja żelaza – mechanizm procesu, sposoby ochrony przed korozją.
37. Omów istotę inwersyjnych technik woltamperometrycznych.
38. Omów sposoby wyznaczania potencjałów formalnych z pomiarów woltamperometrycznych.
39. Podaj kryteria dla odwracalnego procesu elektrodowego w woltamperometrii cyklicznej.
40. Omów budowę i zasadę działania ogniwa Li-jon. Jakie zalety i wady mają te ogniwa?

### **Chemia analityczna i środowiska**

1. Absorpcyjna spektroskopia atomowa w analityce.
2. Emisyjna spektroskopia atomowa w analityce.
3. Spektroskopia UV-VIS i IR w analityce.
4. HPLC i GC w analityce.
5. Porównanie HPLC i TLC, obszary zastosowań, wady i zalety.
6. Chromatografia jonowa w analityce.
7. Obszary zastosowań konduktometrii w analityce.
8. Jak wykonać miareczkowanie kulometryczne. Omówić na dowolnym przykładzie. Schemat układu, detekcja punktu końcowego. Napisać równania reakcji zachodzących na elektrodach i równanie przebiegającej reakcji chemicznej.
9. Kulometria w analityce.
10. Potencjometria w chemii analitycznej.
11. Anodowa, katodowa i adsorpcyjna woltamperometria strippingowa.
12. Spektrometria mas w analityce.
13. Metody analityczne wykorzystujące promieniowanie rentgenowskie
14. Techniki łączone we współczesnej analizie chemicznej
15. Porównanie metod instrumentalnych stosowanych w analizie śladowej metali.
16. Przedstawić metodę dodatku wzorca. W jakich technikach analitycznych można stosować tę metodę?
17. Sposoby mineralizacji. Dlaczego wykonujemy mineralizację na etapie przygotowania próbek do analizy?
18. Analizatory chemiczne i ich rola we współczesnej chemii analitycznej.
19. Omówić sposoby kalibracji metod analitycznych.
20. Wyjaśnić pojęcia: granica wykrywalności, granica oznaczalności, czułość metody analitycznej. Wymieć rodzaje i podać główne przyczyny powstawania błędów w analizie chemicznej.
21. Wymieć i krótko scharakteryzować najważniejsze etapy procesu analitycznego.

22. Zanieczyszczenia powietrza i wód w Polsce i metody ich oznaczeń.
23. Na czym polega walidacja metod analitycznych?
24. Omówić technikę analizy przepływowej.
25. Zastosowania sensorów i biosensorów.
26. Rola analizy specyjnej we współczesnej analityce. Podać przykłady specjacji.
27. Omówić pojęcie „zielona chemia”, w jaki sposób realizowana jest zielona chemia w analityce.
28. Omów istotę rozdzielania w chromatografii cieczowej.
29. Wymień i omów sposoby deproteinizacji próbek biologicznych.
30. Na czym polega proces homogenizacji.
31. Podaj przykłady odczynników stosowanych do redukcji wiązań disiarczkowych.
32. Omów proces przygotowania próbki w kontekście całego procesu analitycznego.
33. Rola standardu wewnętrznego w technikach separacyjnych.
34. Porównaj detektor spektrofotometryczny i spektrofluorymetryczny.
35. Detekcja w elektroforezie kapilarnej.
36. Opisz jedną z technik elektromigracyjnych
37. Zastosowanie elektroforezy żelowej
38. Wyjaśnij pojęcie okna czasowego w micelarnej elektrokinetycznej chromatografii.
39. Opisz mechanizm oraz podaj przykłady zastosowania dializy
40. Efekt cieplarniany, globalne ocieplenie.

### **Chemia fizyczna (pytania dla studentów z KChF i ZFR)**

1. Wymień i omów metody wyznaczania wielkości cząstkowych molowych.
2. Wymień i omów rodzaje układów koloidalnych.
3. Przedstaw różne klasyfikacje związków powierzchniowo czynnych.
4. Omów termodynamikę procesu micelizacji.
5. Wymień i omów co najmniej trzy metody wyznaczania wartości krytycznego stężenia micelizacji (cmc) związku powierzchniowo czynnego.
6. Zdefiniuj funkcje nadmiarowe i mieszania dla roztworów doskonałych.
7. Jakie rodzaje oddziaływań biorą udział przy tworzeniu kompleksów inkluzyjnych?
8. Omów metodę Higuchi-Connors'a wykorzystywaną w badaniach rozpuszczalności.
9. Wyjaśnij, na czym polegają zjawiska hydrofobowe, hydrofobowa hydratacja i oddziaływania hydrofobowe?
10. Omów zastosowania molowej pojemności cieplnej pod stałym ciśnieniem do wyznaczania zmian funkcji termodynamicznych.
11. Omów co najmniej dwie metody pomiaru ciepła molowego pod stałym ciśnieniem.
12. Omów zmiany wielkości termodynamicznych ( $V$ ,  $S$ ,  $H$ ,  $C_p$ ) towarzyszące przemianom fazowym I rodzaju.
13. Omów metodę eksperymentalnego wyznaczania: a) molowej entalpii parowania, b) molowej entalpii topnienia.
14. Jakie funkcje objętościowe można wyznaczyć na podstawie pomiaru gęstości mieszanin dwuskładnikowych w kilku temperaturach?

15. Wyjaśnij słuszność stwierdzenia, że entalpia rozpuszczania jest funkcją termodynamiczną charakteryzującą energetykę procesu tworzenia roztworu.
16. Zdefiniuj standardową entalpię solwatacji i standardową entalpię przeniesienia oraz omów związek między tymi funkcjami.
17. Zdefiniuj, również za pomocą wzorów, objętość molową i nadmiarową objętość molową mieszaniny dwuskładnikowej oraz cząstkową objętość molową składnika tej mieszaniny.
18. Omów rodzaje przemian fazowych w układzie jednoskładnikowym, stan równowagi pomiędzy poszczególnymi fazami oraz czynniki wpływające na zakłócenie tego stanu.
19. Co to jest i od czego zależy stała równowagi tworzenia kompleksów? Omów jakie czynniki mogą wpłynąć na zakłócenie stanu równowagi tworzenia kompleksów.
20. Jakie metody eksperymentalne można wykorzystać do wyznaczenia stałej równowagi tworzenia kompleksów w przypadku, gdy kompleksy tworzą:
  - A) co najmniej jeden reagent jonowy
  - B) reagenty niejonowe.
21. Omów sposób kalibracji przepływu ciepła oraz temperatury kalorymetrów skaningowych.
22. Na czym polega analiza termogravimetryczna (TGA)? Podaj przykłady zastosowania tej metody analizy termicznej.
23. Jakie czynniki wpływają na kształt krzywych termogravimetrycznych (TG)?
24. Omów zasadę działania kalorymetru izotermicznego.
25. Omów zasadę działania kalorymetru nieizotermiczno - nieadiabatycznego.
26. Omów kolejne etapy pomiaru metodą różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC)? Podaj przykłady jej wykorzystania.
27. Wyjaśnij, w jaki sposób na podstawie eksperymentu można wyznaczyć wartość nadmiarowej molowej objętości mieszaniny dwuskładnikowej.
28. Narysuj przebieg krzywej miareczkowania kalorymetrycznego i omów sposób wyznaczenia współczynnika stechiometrycznego kompleksu.
29. Narysuj przebieg krzywej miareczkowania kalorymetrycznego i omów sposób wyznaczenia entalpii reakcji.
30. Omów zastosowanie spektroskopii UV-Vis do wyznaczania stałych tworzenia kompleksów.
31. Omów zastosowanie izotermicznego miareczkowania kalorymetrycznego do wyznaczania stałych tworzenia kompleksów.
32. Wyjaśnij, na czym polega metoda skorygowanego przyrostu temperatury, umożliwiająca wyznaczenie całkowitego efektu cieplnego w kalorymetrach nieizotermiczno – nieadiabatycznych.
33. Podaj przykład procedury wykorzystywanej w analizie termogravimetrycznej do rozdzielania efektów zmian masy pochodzących z dwóch nakładających się reakcji.
34. Jakie wielkości można wyznaczyć bezpośrednio, a jakie pośrednio z miareczkowania kalorymetrycznego?
35. Jakie efekty termiczne możemy zaobserwować na krzywej DSC otrzymanej dla polimeru?
36. Wymień i omów elementy krzywej DSC.
37. Na czym polega wzorcowanie temperaturowe i kalibracja efektów cieplnych w DSC?

38. Omów klasyczną (trój etapową) metodę wyznaczania pojemności cieplnej próbki przy użyciu kalorymetru skaningowego.
39. Wyjaśnij, jak metodą DSC można oznaczyć czystość próbki.
40. Jaka jest różnica między powtarzalnością i odtwarzalnością pomiaru. Wyjaśnij na przykładzie pomiaru dowolnie wybranej wielkości fizykochemicznej.

### **Chemia teoretyczna**

1. Podać treść i omówić zasadę nieoznaczoności Heisenberga dla dwóch wielkości mierzonych, A i B.
2. Ze wzoru ogólnego na błędy pomiaru wyprowadzić postać zasady nieoznaczoności Heisenberga dla przypadku, gdy wielkościami mierzonymi jest położenie  $x$  oraz pęd  $p_x$  cząstki poruszającej się w układzie jednowymiarowym wzdłuż osi OX. Zinterpretować uzyskany wynik.
3. Omówić I postulat mechaniki kwantowej (o istnieniu funkcji falowej). Wyjaśnić związek pomiędzy normowaniem funkcji a jej interpretacją probabilistyczną.
4. Podać treść postulatu mówiącego o tym, jak w mechanice kwantowej opisywane są obserwabla. Stosując odpowiednie reguły, z klasycznego wyrażenia na energię kinetyczną cząstki o masie  $m$  w przestrzeni trójwymiarowej w układzie kartezjańskim wyprowadzić wzór na operator energii kinetycznej tej cząstki.
5. Zapisać równania Schrödingera: a) zawierające czas, b) nie zawierające czasu. Omówić sens symboli występujące w tych równaniach.
6. Podać treść postulatu o wartości własnej operatora i omówić jego związek z równaniem Schrödingera niezależnym od czasu.
7. Omówić kwantowy oscylator harmoniczny i przeanalizować różnice między kwantowym i klasycznym oscylatorem harmonicznym.
8. Na przykładzie cząstki poruszającej się w układzie jednowymiarowym omówić, jak mechanika kwantowa wyjaśnia efekt tunelowy.
9. Omówić liczby kwantowe występujące w rozwiązaniu radialnej części równania Schrödingera dla atomu wodoru. Przeanalizować zależność pomiędzy tymi liczbami, w szczególności wskazać, z czego ona wynika.
10. Omówić liczby kwantowe występujące w rozwiązaniu kątowej części równania Schrödingera dla atomu wodoru. Przeanalizować zależność pomiędzy tymi liczbami, w szczególności wskazać, z czego ona wynika.
11. Podać jak w mechanice kwantowej definiuje się spin elektronu. Omówić liczby kwantowe związane ze spinem elektronu.
12. Omówić pojęcie radialnej gęstości prawdopodobieństwa i porównać jej wykresy otrzymane z rozwiązań równania Schrödingera dla atomu wodoru, gdy główna liczba kwantowa wynosi 3.
13. Zdefiniować pojęcia: orbital, warstwica, powierzchnia węzłowa oraz kontur orbitalu. Omówić ich sens na przykładzie dwóch wybranych orbitali typu  $d$ .
14. Na przykładzie orbitali  $2p$  omówić zależność pomiędzy konturem orbitalu oraz konturem gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu wokół jądra atomowego.
15. Narysować kontury orbitali  $3p_x, 3p_y, 3p_z$ . Przeanalizować związki tych orbitali z orbitalami  $3p_{-1}, 3p_0, 3p_1$  i porównać określające je liczby kwantowe.



16. Wymienić rzeczywiste i zespolone orbitale  $3d$  i zapisać wzory definiujące zależności między tymi dwiema grupami orbitali. Dla dwóch wybranych orbitali rzeczywistych  $3d$  podać wartości liczb kwantowych.
17. Podać treść postulatu mechaniki kwantowej o wartości średniej oraz omówić jego związek z metodą wariacyjną.
18. Podać twierdzenie stanowiące podstawę metody wariacyjnej. Omówić postać funkcji próbnej w metodzie Ritza.
19. Co to jest wyznacznik Slatera i jaki jest jego związek z przybliżeniem jednoelektronowym? Omówić zwięźle konsekwencje stosowania tego przybliżenia.
20. Co to są bazy funkcyjne? Omówić różnice pomiędzy bazami STO i GTO.
21. Omówić szczegółowo znaczenie symboli: 6-31G, 6-31G\*\* i 6-31++G.
22. Omówić podstawy rachunku zaburzeń Rayleigha-Schrödingera.
23. Na przykładzie jonu  $H_2^+$  omówić, jak w metodzie LCAO MO tworzone są orbitale molekularne.
24. Narysować kontury i omówić orbitale molekularne wiążące i antywiążące utworzone w cząsteczce dwuatomowej homojądrowej z orbitali atomowych o głównej liczbie kwantowej równej 3. Wskazać główną cechę orbitali molekularnych antywiążących.
25. Co to jest korelacja elektronowa? Podać przynajmniej dwie metody chemii teoretycznej, które pozwalają uwzględnić w obliczeniach energię korelacji. Omówić zwięźle jedną z tych metod.
26. Podać treść pierwszego twierdzenia Hohenberga-Kohna oraz podstawowe cechy gęstości elektronowej.
27. Podać treść drugiego twierdzenia Hohenberga-Kohna i jego interpretację.
28. Zdefiniować co to jest multipletowość atomu lub cząsteczki i omówić wzór pozwalający ją obliczyć. Podać i uzasadnić wartości multipletowości dla: atomu tlenu O oraz cząsteczki  $O_2$ .
29. Omówić co to są termy atomowe. Zapisać ogólny symbol termu i wyjaśnić występujące w nim symbole.
30. Podać reguły wyznaczania i porządkowania termów atomowych.
31. Omówić pojęcie optymalizacji geometrii stanu podstawowego cząsteczki. Podać trzy przykłady algorytmów optymalizacyjnych stosowanych w chemii teoretycznej.
32. Omówić podstawowe pojęcia i założenia leżące u podstaw metod mechaniki molekularnej.
33. Przedstawić najprostsze postacie funkcyjne stosowane w metodach mechaniki molekularnej do opisu oddziaływań wiążących.
34. Przedstawić najprostsze postacie funkcyjne stosowane w metodach mechaniki molekularnej do opisu oddziaływań niewiążących.
35. Omówić na czym polega zabieg „cutoff” w mechanice molekularnej.
36. Zdefiniować ogólne pojęcie trajektorii w symulacji komputerowej i wskazać różnice w definiowaniu trajektorii w różnych metodach symulacyjnych.
37. Zaprezentować sposoby rozwiązywania równań ruchu w metodzie dynamiki molekularnej.
38. Omówić zwięźle metodę Monte Carlo.
39. Podać równanie ruchu Langevina. Wskazać podstawowe różnice pomiędzy dynamiką molekularną i dynamiką Langevina.
40. Omówić pojęcie periodycznych warunków brzegowych i podać, w jakim celu są one stosowane.

## Krystalografia

### Symetria i rentgenografia strukturalna:

1. Porównaj operacje symetrii: odbicie w płaszczyźnie i obrót wokół osi. Na wybranych przykładach omów pojęcia: punktowa operacja symetrii, operacja symetrii I-go i II-go rodzaju, element symetrii.
2. Porównaj operacje symetrii: obrót wokół osi i obrót śrubowy. Na wybranych przykładach omów pojęcia: punktowa operacja symetrii, otwarta operacja symetrii, niezmiennik przekształcenia.
3. Porównaj operacje symetrii: odbicie w płaszczyźnie i odbicie ślizgowe. Na wybranych przykładach omów pojęcia: punktowa operacja symetrii, otwarta operacja symetrii, niezmiennik przekształcenia.
4. Czym różnią się grupy centrosymetryczne od niecentrosymetrycznych. Jaki to ma wpływ na opis budowy molekularnej cząsteczek chiralnych?
5. Porównaj symbolikę Hermanna-Mauguina (krystalograficzną) i Schoenfliesa na podstawie trzech wybranych grup punktowych z układów jednoskośnego, rombowego i tetragonalnego.
6. Czym jest układ krystalograficzny? Co stanowi kryterium określające przynależność do układu krystalograficznego? Scharakteryzuj jeden wybrany układ krystalograficzny.
7. Podaj definicję postaci prostej. Czym różni się postać prosta zamknięta od otwartej? Omów symetrię wybranej postaci prostej otwartej i zamkniętej z układów rombowego oraz tetragonalnego.
8. Wymień rodzaje translacyjnych elementów symetrii. Podaj ich definicje oraz przykłady.
9. Wymień 14 typów sieci Bravais'go według przynależności do układów krystalograficznych.
10. Omów diagram wybranej przez siebie grupy przestrzennej z klasy symetrii  $2/m$ .
11. Omów diagram wybranej przez siebie grupy przestrzennej z klasy symetrii  $mm2$ .
12. Na czym polega dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego w ciałach krystalicznych? Jak to zjawisko opisuje równanie Bragga?
13. Jakie informacje o budowie kryształu są ukryte w tzw. kątach braggowskich?
14. Wyjaśnij związek pomiędzy symetrią punktową kryształu a symetrią efektu dyfrakcyjnego uwzględniając następujące zagadnienia: prawo Friedla i klasy Lauego.
15. Czym są wygaszenia systematyczne refleksów dyfrakcyjnych i co jest ich źródłem?
16. Co to jest czynnik struktury i jaki jest jego związek z natężeniem refleksu (promienia dyfrakcyjnego)? Przedstaw odpowiedni wzór.
17. Wyjaśnij jakie informacje o strukturze krystalicznej związane są z czynnikiem struktury.
18. Jakie są dwie podstawowe metody poszukiwania modelu próbnego struktur krystalicznych? Co je różni?
19. Jak przygotować próbkę monokrystaliczną do pomiaru dyfraktometrycznego?
20. Wymień najpopularniejsze źródła promieni rentgenowskich.
21. Wymień i krótko scharakteryzuj etapy rentgenowskiej analizy strukturalnej monokryształów, od przygotowania próbki do analizy budowy cząsteczkowej kryształu.
22. Wymień i krótko scharakteryzuj kolejne etapy ustalenia struktury kryształu na podstawie danych dyfrakcyjnych.
23. Wymień i krótko scharakteryzuj parametry geometryczne stosowane w opisie struktury cząsteczkowej związków chemicznych?

24. Jakie elementy symetrii można wskazać dla idealnych konformacji (pofałdowanych) pierścieni 6-członowych?
25. Jakie elementy symetrii można wskazać dla idealnych konformacji (pofałdowanych) pierścieni 5-członowych?

### Teoria oddziaływań:

26. Podaj definicję gęstości elektronowej, funkcji jednoelektronowej gęstości i funkcji wieloelektronowej gęstości. W przypadku dwóch ostatnich pojęć wyjaśnij źródła z jakich te funkcje można pozyskać.
27. Omów podstawowe założenia teorii AIM (Atoms in Molecules).
28. Jakie ekstrema (punkty krytyczne w ujęciu teorii AIM) posiada funkcja gęstości elektronowej?
29. Jakie rodzaje punktów krytycznych gęstości elektronowej (w ujęciu teorii AIM) można wskazać w cząsteczce cykloheksanu?
30. Jakie rodzaje punktów krytycznych gęstości elektronowej (w ujęciu teorii AIM) można wskazać w cząsteczce adamantanu?
31. Omów relacje między parametrami funkcji gęstości elektronowej w punkcie krytycznym wiązania chemicznego a właściwościami (chemicznymi i fizycznymi) tego wiązania.
32. Zdefiniuj laplasjan gęstości elektronowej. Omów jego zastosowanie w analizie wiązań chemicznych.
33. Omów mechanizm powstawania wiązania wodorowego. Scharakteryzuj parametry geometryczne opisujące wiązanie wodorowe.
34. Czym charakteryzuje się wiązanie wodorowe wspomagane ładunkiem? Podaj przykłady.
35. Czym charakteryzuje się wiązanie wodorowe wspomagane rezonansem? Podaj przykłady.
36. Czym charakteryzuje się wiązanie wodorowe wspomagane polaryzacją? Podaj przykłady.
37. Omów mechanizm powstawania wiązania halogenowego. Scharakteryzuj parametry geometryczne opisujące wiązanie halogenowe.
38. Przedyskutuj różnice i podobieństwa występujące pomiędzy wiązaniem wodorowym i halogenowym.
39. Wymień i scharakteryzuj rodzaje oddziaływań międzycząsteczkowych.
40. Wymień i krótko scharakteryzuj podstawowe indeksy aromatyczności.

### Technologia chemiczna

#### *Techniki pomiarowe, właściwości materiałów*

1. Scharakteryzuj zasadę działania transmisyjnego mikroskopu elektronowego (TEM).
2. Omów i przedstaw zasadę działania skaningowego mikroskopu elektronowego (SEM).
3. Omów i przedstaw zasadę działania spektrometrii mas jonów wtórnych (SIMS).
4. Przedstaw możliwości pomiarowe techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS).
5. Objasnij zasadę działania mikroskopu sił atomowych (AFM) pracującego w modzie kontaktowym.
6. Omów i przedstaw zasadę działania mikroskopu sił atomowych (AFM) pracującego w modzie półkontaktowym-„tapping mode”
7. Scharakteryzuj metody pomiaru tarcia w nano i mikroskali.
8. Przedstaw zasadę działania skaningowego mikroskopu tunelowego (STM).

9. Jakimi technikami można określić właściwości mechaniczne, elektryczne oraz magnetyczne nanomateriałów?
10. Przedstaw zastosowanie spektroskopii w podczerwieni (IR) w badaniach nanomateriałów.

#### *Zajęcia specjalistyczne*

11. Podaj definicję i narysuj schemat budowy cząsteczki środka powierzchniowo czynnego (SPC).
12. Narysuj po dwa przykłady wzorów strukturalnych środków powierzchniowo czynnych anionowych, kationowych i niejonowych oraz podaj ich nazwy.
13. Opisz na czym polega zjawisko micelizacji cząsteczek środków powierzchniowo czynnych w roztworach wodnych i wymień typy struktur, które mogą one tworzyć. W jaki sposób można zmierzyć wartość krytycznego stężenia micelarnego?
14. Wyjaśnij pochodzenie zjawiska napięcia powierzchniowego. Dlaczego środki powierzchniowo czynne obniżają napięcie powierzchniowe?
15. Omów budowę, metodę otrzymywania oraz działanie dodatków uszlachetniających do baz olejowych na przykładzie dialkyloditiofosforanu cynku (ZDTP).
16. Omów rolę adsorpcji w procesie tarcia.
17. Wymień i omów zjawiska fizykochemiczne występujące w styku tarciovym.

#### *Wykład monograficzny*

18. Zinterpretuj wypowiedź Richarda Phillipsa Feynmana "*There's Plenty of Room at the Bottom*".
19. Co to jest nanomateriał i co go odróżnia od materiałów „klasycznych”?
20. Jakie właściwości fizykochemiczne są charakterystyczne dla nanomateriałów?
21. Porównaj metody wytwarzania nanomateriałów oparte o strategię „z dołu do góry” i „z góry do dołu”.
22. Podaj znane Ci metody wytwarzania nanocząstek.
23. Dlaczego nanocząstki w koloidach wymagają stabilizacji podaj przykłady stabilizatorów.
24. Omów znane Ci nanomateriały węglowe.
25. Omów znane Ci zastosowania nanomateriałów węglowych.
26. Omów znane Ci zastosowania nanocząstek metalicznych.
27. Omów właściwości nanokompozytów na wybranych przykładach.
28. Wytwarzanie materiałów nanokompozytowych - podaj przykładowe materiały stosowane jako wypełniacze i osnowy.
29. Omów znane Ci zastosowania nanokompozytów.
30. Opisz metody wytwarzania monowarstw i cienkich powłok.

#### *Technologia chemiczna II*

31. Wymień i opisz zintegrowane procesy separacyjno-reaktywne w technologii chemicznej.
32. Podaj przykłady stałych kwasów oraz reakcji zachodzących przy ich udziale.
33. Scharakteryzuj właściwości fizykochemiczne wody w stanie nadkrytycznym, ważne z punktu widzenia procesów technologicznych.
34. Podaj przykłady reakcji zachodzących w wodzie w stanie pod- i nadkrytycznym.

35. Opisz procesy pozwalające na termokatalityczną degradację polimerów i substancji szkodliwych – hydromax oraz MSO (melting salt oxidation).
36. Opisz zaawansowane techniki utleniania na przykładzie ozonolizy i utleniania fotokatalitycznego.
37. Scharakteryzuj metodę zaawansowanego procesu utleniania opartego na układzie Fentona. Podaj odpowiednie równania reakcji.
38. Podaj definicję krytycznego stężenia micelarnego i punktu Kraffta.
39. Wymień trzy przykłady metod zaawansowanego utleniania i krótko opisz ich podstawy.
40. Podaj dwa przykłady procesów technologicznych opartych na reakcjach polikondensacji. Podaj równania reakcji i scharakteryzuj powstające produkty.

## **Dydaktyka chemii**

### **Koszyk 1**

1. Wymień i zdefiniuj cele ogólne kształcenia chemicznego.
2. Zdefiniuj metody aktywizujące. Opisz jedną z metod aktywizujących, którą uważasz za najciekawszą i najbardziej efektywną w nauczaniu chemii.
3. Wymień i opisz elementy na jakie należy zwrócić uwagę podczas hospitacji lekcji.
4. Wymień i opisz urządzenia i środki dydaktyczne stosowane w praktyce szkolnej w edukacji chemicznej.
5. Zdefiniuj taksonomię celów nauczania. Wymień i opisz najstarszą taksonomię celów nauczania i obecnie obowiązującą w Polsce.
6. Wymień i opisz sposób kształcenia dowolnie wybranej umiejętności, którą powinien zdobyć uczeń szkoły średniej.
7. Wymień i opisz sposób wykorzystania tego samego, dowolnego eksperymentu chemicznego jako:  
a) eksperymentu ilustracyjnego, b) eksperymentu problemowo-weryfikującego.
8. Zdefiniuj metody kształcenia chemicznego oraz wymień obecnie obowiązujący ich podział.
9. Wymień i opisz warunki prawidłowo przeprowadzonego pokazu eksperymentu chemicznego.
10. Wymień i opisz zalety i wady metod poszukujących i podających
11. Omów zalety i wady pracy w grupie.
12. Wymień i opisz kryteria doboru treści kształcenia konieczne przy konstruowaniu programów kształcenia chemicznego.
13. Omów zależność między celami kształcenia, a wymaganiami na poszczególne oceny.
14. Wymień i opisz funkcje jakie może pełnić praca domowa ucznia.
15. Omów na dowolnym przykładzie etapy lekcji prowadzonej metodą problemową.
16. Omów wady i zalety nauczania wspomaganego komputerem oraz pracy online.
17. Omów rolę nauczyciela względem ucznia ze specjalnymi potrzebami edukacyjnymi.
18. Dokonaj porównania systemu edukacji w Polsce i Finlandii.
19. Jak zmotywować ucznia do nauki chemii?
20. Jakie metody wykorzystasz do przygotowania lekcji powtórzeniowej online?

### **Koszyk 2**

21. Przedstaw i omów cele operacyjne lekcji „Budowa atomu pierwiastka a jego położenie w układzie okresowym” wykorzystującej umiejętność złożoną.
22. Przedstaw i omów cele operacyjne lekcji podsumowującej dział „Wiązania chemiczne”.

23. Zaprojektuj szkolne doświadczenia obrazujące różnice aktywności pierwiastków znajdujące się w tej samej grupie układu okresowego oraz w tym samym okresie.
24. Zaprojektuj szkolne doświadczenia obrazujące właściwości redoks jonów chromianowych(VI), manganianowych(VII), nadtlenu wodoru.
25. Wybierz jedną umiejętność złożoną i omów ją na przykładzie lekcji z działu „Roztwory i reakcje zachodzące w roztworach wodnych.” obowiązującej podstawy programowej kształcenia ogólnego z chemii.
26. Skonstruuj zadanie rachunkowe badające umiejętności interpretacji wielkości fizykochemicznych i obliczeń dotyczące pH roztworu.
27. Zaprojektuj schemat ciągu reakcji dotyczący otrzymywania i właściwości chemicznych związków nieorganicznych (tlenków, wodorotlenków, kwasów oraz soli). Napisz równania reakcji do zaproponowanego ciągu.
28. Zaprojektuj lekcję wprowadzającą do działu „Węglowodory” obowiązującej podstawy programowej kształcenia ogólnego z chemii.
29. Przedstaw propozycję zadania do pracy klasowej z działu „Hydroksylowe pochodne węglowodorów – alkohole i fenole” badającą umiejętności proste. Do zadania zaproponuj schemat oceniania oraz wymagania obowiązującej podstawy programowej kształcenia ogólnego z chemii.
30. Zaprojektuj szkolne doświadczenia chemiczne pozwalające wykryć związki karbonylowe.
31. Przedstaw i omów cele operacyjne do lekcji dotyczącej właściwości fizycznych kwasów karboksylowych.
32. Zaprojektuj schemat ciągu reakcji dotyczący otrzymywania i właściwości chemicznych węglowodorów, fluorowcopochodnych węglowodorów, związków zawierających atom tlenu oraz azotu w swojej cząsteczce. Napisz równania reakcji do zaproponowanego ciągu.
33. Przedstaw i omów cele operacyjne do lekcji dotyczącej mechanizmu reakcji estryfikacji.
34. Zaprojektuj szkolne doświadczenia chemiczne pozwalające wykryć białka.
35. Zaproponuj pomoce naukowe wykorzystywane podczas lekcji dotyczącej tworzyw naturalnych i sztucznych.
36. Zaproponuj jedno równanie reakcji na podstawie którego wprowadzisz w szkole pojęcia: reakcje utleniania-redukcji, utleniacz i reduktor oraz jedno równanie reakcji na podstawie którego wprowadzisz bilansowanie reakcji utleniania-redukcji. Odpowiedź uzasadnij.
37. Zaprojektuj doświadczenia chemiczne z różnych działów chemii z wykorzystaniem produktów z życia codziennego, które możesz wykorzystać na lekcjach chemii.
38. Wymień kompetencje kluczowe. Zaplanuj lekcję, podczas której będą weryfikowane kompetencje kluczowe. Wskaż związek kompetencji kluczowych z wymaganiami obowiązującej podstawy programowej.
39. Zaproponuj doświadczenie do wykonania przez uczniów w domu do tematu lekcji „Roztwory i reakcje zachodzące w roztworach wodnych”.
40. Zaproponuj doświadczenie do wykonania przez uczniów w domu do tematu lekcji „Nienasycony charakter związków organicznych”.