

**Chemia fizyczna : podręcznik dla studentów farmacji i analityki
medycznej / redakcja naukowa Tadeusz W. Hermann ; autorzy Adam
Buciński [i 14 pozostałych]. – Wyd. 1, 1 dodr. – Warszawa, 2017**

Spis treści

1. Elementy termodynamiki chemicznej - Tadeusz W. Hermann	15
1.1. Zakres i podstawowe pojęcia	15
1.2. Pierwsza zasada termodynamiki	16
1.2.1. Pojęcie energii wewnętrznej	16
1.2.2. Praca objętościowa	18
1.2.3. Pojemność cieplna układu w stałej objętości	21
1.2.4. Pojęcie entalpii	23
1.2.5. Pojemność cieplna układu pod stałym ciśnieniem	24
1.3. Elementy termochemii	25
1.3.1. Liczba postępu reakcji	25
1.3.2. Ciepło reakcji w stałej objętości i pod stałym ciśnieniem	26
1.3.3. Wpływ temperatury na ciepło reakcji. Prawa Kirchhoffa	28
1.3.4. Ciepło tworzenia	30
1.3.5. Ciepło spalania	32
1.3.6. Prawo Hessa	34
1.4. Druga zasada termodynamiki	37
1.4.1. Procesy odwracalne i nieodwracalne	37
1.4.2. Pojęcie entropii	38
1.4.3. Pojęcie energii swobodnej i entalpii swobodnej	41
1.4.4. Produkcja entropii w reakcji chemicznej. Powinowactwo chemiczne	46
1.5. Elementy statyki chemicznej	47
1.5.1. Pojęcie potencjału chemicznego	47
Potencjał chemiczny składnika roztworu doskonałego	49
1.5.2. Prawo działania mas	51
1.5.3. Zależność stałych równowagi od temperatury	52
1.5.4. Związek entalpii swobodnej i stałej równowagi. Izoterma van't Hoffa	55
1.5.5. Właściwości stałej równowagi reakcji	57
1.5.6. Potencjał chemiczny składnika roztworu rzeczywistego	58
1.5.7. Trzecia zasada termodynamiki	58
Piśmiennictwo	60
 2. Układy jednofazowe jednoskładnikowe	 61
- Jerzy Wojciech Łukasiak, Roman Kaliszan	
2.1. Rozkład Boltzmanna i energia cząsteczek	61
2.2. Przemiany fizyczne układów jednoskładnikowych	65

2.2.1. Podstawowe pojęcia	65
2.2.2. Temperatura krytyczna	67
2.2.3. Temperatura topnienia, punkt krytyczny i punkt potrójny	68
2.3. Gazy	71
2.3.1. Gaz doskonały. Równanie stanu gazu doskonałego	71
2.3.2. Ciśnienie cząstkowe	75
2.3.3. Właściwości fizykochemiczne cząsteczek gazu doskonałego	76
2.3.4. Prędkość cząsteczek gazu	77
2.3.5. Gazy rzeczywiste	78
2.4. Ciecze i ich właściwości	80
2.4.1. Napięcie powierzchniowe	80
2.4.2. Metody wyznaczania napięcia powierzchniowego	83
Metoda kapilarna	83
Metoda stalagmometryczna	84
Metoda pęcherzykowa	85
2.4.3. Lepkość cieczy	87
Ciecze niutonowskie i nienitonowskie	91
2.4.4. Płyn w stanie nadkrytycznym	93
2.5. Ciała stałe	96
2.5.1. Cechy ciała stałego	96
2.5.2. Kryształy	96
Izomorfizm i polimorfizm	99
Ciekłe kryształy	101
2.5.3. Substancje bezpostaciowe	105
2.5.4. Właściwości ciał stałych	106
Przewodnictwo cieplne	106
Przewodnictwo elektryczne ciał stałych	106
Nadprzewodnictwo	107
2.6. Fizyczne metody badania przemian fazowych. Analiza termiczna	108
Termograwimetria	108
Różnicowa kalorymetria skaningowa (differential Canning calorimetry, DSC)	109
Zastosowanie DSC	110
Piśmiennictwo	114
3. Równowagi fazowe - Łucja Skibińska	115
3.1. Wprowadzenie	115
3.2. Reguła faz Gibbsa	115
3.3. Równowagi fazowe w układach jednoskładnikowych	117
3.3.1. Ciepło przemiany fazowej. Równanie Clausiusa-Clapeyrona	117
3.3.2. Diagramy fazowe w układach jednoskładnikowych	122
3.4. Roztwory nieelektrolitów	125
3.4.1. Klasyfikacja roztworów i ich właściwości	125
3.4.2. Roztwory doskonałe	126
Mieszanki gazów. Prawo Daltona	127

Mieszanie gazów jako proces nieodwracalny	128
Prężność pary nad roztworem doskonałym i rzeczywistym.	
Prawo Raoult'a i prawo Henry'ego	129
3.4.3. Właściwości koligatywne roztworów	135
Obniżenie prężności pary	135
Podwyższenie temperatury wrzenia	137
Obniżenie temperatury krzepnięcia	140
Ciśnienie osmotyczne	141
Wpływ temperatury na rozpuszczalność ciała stałego w cieczy	145
3.4.4. Roztwory gazów w cieczach	149
3.4.5. Mieszaniny lotnych cieczy. Układy dwuskładnikowe	153
Ciecze mieszające się nieograniczenie	153
Ciecze mieszające się ograniczenie	161
Ciecze niemieszające się	167
Diagramy fazowe układu ciecz-ciało stałe. Mieszaniny eutektyczne	169
3.5. Równowagi fazowe w układach trójskładnikowych	173
3.5.1. Trójkąt stężeń Gibbsa	173
3.5.2. Prawo podziału Nernsta	178
Piśmiennictwo	182

4. Równowagi w roztworach elektrolitów - Joanna Szymura-Oleksiak **183**

4.1. Wprowadzenie	183
4.2. Dysocjacja elektrolityczna	184
4.2.1. Wprowadzenie	184
4.2.2. Stopień dysocjacji	184
4.3. Kwasy i zasady	188
4.3.1. Teoria Arrheniusa	188
4.3.2. Teoria Brönsteda i Lowry'ego	189
4.3.3. Teoria rozpuszczalnikowa	191
4.3.4. Teoria Lewisa	192
4.4. Teoria mocnych elektrolitów. Aktywność, współczynnik aktywności	193
4.5. Dysocjacja słabych kwasów i zasad	198
4.5.1. Stała dysocjacji i wykładnik stałej dysocjacji. Prawo rozcieńczeń Ostwalda	198
4.5.2. Stałe dysocjacji sprzężonej pary kwas-zasada	201
4.6. Dysocjacja wody	204
4.6.1. Iloczyn jonowy wody. Wykładnik jonów wodorowych	204
4.6.2. Wskaźniki pH	206
4.6.3. Wpływ pH na stopień dysocjacji słabych kwasów i słabych zasad	208
4.7. Stężenie jonów wodorowych i pH roztworów w stanie równowagi kwasowo-zasadowej	210
4.7.1. Stężenie jonów wodorowych oraz pH roztworów mocnych kwasów i roztworów mocnych zasad	210
4.7.2. Stężenie jonów wodorowych oraz pH roztworów słabych kwasów i roztworów słabych zasad	211

4.7.3. Elektrolity amfoteryczne (amfolity)	213
4.7.4. Hydroliza soli, stopień i stała hydrolizy, pH roztworów soli	216
Roztwór soli słabego kwasu i mocnej zasady	217
pH roztworu soli słabego kwasu i mocnej zasady	219
Roztwór soli słabej zasady i mocnego kwasu	220
pH roztworu soli słabej zasady i mocnego kwasu	220
Roztwór soli słabego kwasu i słabej zasady	221
pH roztworu soli słabego kwasu i słabej zasady	222
pH roztworów soli kwasów wieloprotonowych	223
Roztwór soli mocnego kwasu i mocnej zasady	224
4.7.5. Roztwory buforowe	226
Pojemność buforowa	232
4.8. Iloczyn rozpuszczalności	236
4.9. Wpływ pH na rozpuszczalność leków o charakterze słabych kwasów lub słabych zasad	239
4.10. Wpływ pH na transport leków przez błony biologiczne	242
4.11. Kinetyka procesu rozpuszczania ciał stałych w cieczach - Adam Buciński, Roman Kaliszan	245
4.11.1. Wstęp	245
4.11.2. Ciała stałe	246
4.11.3. Rozpuszczalniki	250
4.11.4. Rozpuszczanie ciał stałych w cieczach	252
Modele rozpuszczania	255
Równanie Boguskiego	257
4.11.5. Badanie szybkości rozpuszczania substancji leczniczych zawartych w preparatach farmaceutycznych	259
Piśmiennictwo	263
5. Elektrochemia - Wiesław Gawel	264
5.1. Wstęp	264
5.2. Potencjometria	265
5.2.1. Wprowadzenie	265
5.2.2. Pojęcia potencjału, elektrody i półogniwa	265
5.2.3. Powstawanie potencjału elektrody	266
5.2.4. Bezwzględny potencjał elektrody (półogniwa)	268
5.2.5. Elektrody (półogniwa) I rodzaju	269
5.2.6. Elektrody (półogniwa) II rodzaju	274
5.2.7. Elektrody (półogniwa) III rodzaju	278
5.2.8. Elektrody (półogniwa) oksydacyjno-redukcyjne	279
5.2.9. Elektrody (półogniwa) membranowe (jonoselektywne, ISE)	283
5.2.10. Ogniwa galwaniczne	289
5.2.11. Siła elektromotoryczna ogniwa galwanicznego	296
5.2.12. Pomiar potencjałów elektrod	299
5.2.13. Zastosowania potencjometrii	301
Pomiary pH (pehametria)	301

Wyznaczanie stałej dysocjacji	302
Wyznaczanie iloczynu rozpuszczalności	302
Miareczkowanie potencjometryczne	303
5.3. Korozja elektrochemiczna	304
5.3.1. Definicja korozji elektrochemicznej	304
5.3.2. Ogniwo nieodwracalne	305
5.3.3. Korozja konstrukcji metalowych	306
5.3.4. Ochrona przed korozją	308
5.4. Elektroliza	309
5.4.1. Ogólna charakterystyka procesu	309
5.4.2. Przykłady elektrolizy	310
5.4.3. Prawa rządzące elektrolizą	312
5.4.4. Zastosowania elektrolizy	316
5.5. Konduktometria	318
5.5.1. Istota konduktometrii	318
5.5.2. Konduktancja i konduktywność	319
5.5.3. Ruchliwość i liczby przenoszenia jonów	321
5.5.4. Zasada pomiaru konduktancji	325
5.5.5. Zastosowania konduktometrii	326
Piśmiennictwo	328

6. Zjawiska powierzchniowe i układy dyspersyjne

- <i>Tadeusz H. Dzido, Władysław Gołkiewicz</i>	330
6.1. Oddziaływania międzycząsteczkowe	330
6.1.1. Oddziaływania międzycząsteczkowe van der Waalsa	330
Oddziaływania dipol-dipol	334
Oddziaływania dipol-dipol indukowany	335
Oddziaływania dyspersyjne	336
6.1.2. Wiązanie wodorowe	337
6.1.3. Efekt hydrofobowy	340
6.2. Zjawiska międzyfazowe	341
6.2.1. Adhezja i kohezja	341
6.2.2. Napięcie międzyfazowe a napięcie powierzchniowe. Kąt zwilżania	342
6.2.3. Adsorpcja	345
Adsorpcja na granicy faz ciecz-gaz	345
Adsorpcja na granicy faz ciecz-ciecz	348
Adsorpcja na powierzchni ciała stałego	350
6.2.4. Chromatografia	358
Chromatografia cienkowarstwowa, TLC	359
Wysokosprawna chromatografia cieczowa, HPLC	363
Chromatografia gazowa, GC	366
6.3. Układy dyspersyjne	369
6.3.1. Rodzaje układów dyspersyjnych	369
6.3.2. Układ koloidalny	370
6.3.3. Podział układów koloidalnych	371

6.3.4. Metody otrzymywania układów koloidalnych	374
Metody kondensacyjne	374
Metody dyspersyjne	375
Metody oczyszczania roztworów koloidalnych	375
6.3.5. Budowa układów koloidalnych	377
Koloidy fazowe	377
Koloidy cząsteczkowe	378
Koloidy asocjacyjne	379
6.3.6. Właściwości układów koloidalnych	380
Właściwości optyczne koloidów	380
Właściwości kinetyczne koloidów	382
Właściwości elektryczne koloidów	393
6.3.7. Trwałość roztworów koloidalnych	400
6.3.8. Solubilizacja	405
6.4. Układy dyspersyjne stosowane w farmacji	406
6.4.1. Wprowadzenie	406
6.4.2. Emulsje	406
Mikroemulsje	408
6.4.3. Zawiesiny	409
6.4.4. Żele	409
6.4.5. Mikrocząstki	410
6.4.6. Liposomy	411
Piśmiennictwo	411

7. Metody fizyczne w chemii strukturalnej

- <i>Iwona Wawer, Piotr Cysewski</i>	413
7.1. Zasady spektroskopii molekularnej - <i>Iwona Wawer</i>	413
7.1.1. Podstawowe pojęcia	413
7.1.2. Energia molekuł	415
7.1.3. Absorpcja światła	416
7.1.4. Moment dipolowy, polaryzowalność i refrakcja	417
7.1.5. Dyspersja skręcalności optycznej, dwójłomność i dichroizm kołowy	420
7.2. Widma podczerwieni, IR - <i>Iwona Wawer</i>	423
7.3. Widma Ramana - <i>Iwona Wawer</i>	430
7.4. Widma elektronowe - <i>Iwona Wawer</i>	433
7.4.1. Widma absorpcyjne w ultrafiolecie i świetle widzialnym (UV-VIS)	433
7.4.2. Widma emisyjne, fluorescencja i fosforescencja	437
7.4.3. Atomowe widma emisyjne	439
7.4.4. Lasery i ich zastosowania	441
7.5. Magnetyczny rezonans jądrowy, NMR - <i>Iwona Wawer</i>	442
7.5.1. Widma NMR w fazie ciekłej	442
7.5.2. Widma NMR ciała stałego	459
7.5.3. Tomografia i mikrotomografia	461
7.6. Elektronowy rezonans paramagnetyczny, EPR - <i>Iwona Wawer</i>	463
7.7. Inne metody - <i>Iwona Wawer</i>	467

7.7.1. Dyfrakcja promieni rentgenowskich, XRD	467
7.7.2. Spektrometria mas, MS	469
7.8. Wprowadzenie do zastosowań chemii obliczeniowej w projektowaniu leków - <i>Piotr Cysewski</i>	473
7.8.1. Wstęp	473
7.8.2. Najważniejsze metody modelowania molekularnego	476
Metody <i>ab initio</i>	476
Metody <i>first principle</i>	482
Metody półempiryczne	484
Metody empiryczne - pola siłowe	486
7.8.3. Co to jest lek?	491
7.8.4. Struktura leku a jego aktywność	495
Właściwości strukturalne a aktywność biologiczna	495
Właściwości protolityczne a aktywność biologiczna	501
Właściwości solwatacyjne a aktywność biologiczna	505
Rozpuszczalność a aktywność biologiczna	509
7.8.5. Przykłady zastosowań modelowania molekularnego w projektowaniu leków	513
Budowa farmakofora	513
Metoda QSAR	520
Piśmiennictwo	529

8. Kinetyka chemiczna i farmakokinetyka

- <i>Tadeusz W. Hermann, Przemysław Łoś, Emil Ratajczak, Joanna Szymura-Oleksiak</i>	531
8.1. Elementy kinetyki chemicznej - <i>Tadeusz W. Hermann</i>	531
8.1.1. Rola kinetyki chemicznej w farmakologii	531
8.1.2. Pojęcie szybkości reakcji chemicznej w układzie homogenicznym	532
8.1.3. Rzędowość i cząsteczkowość reakcji chemicznej	533
8.1.4. Reakcje zerowego rzędu	535
8.1.5. Reakcje pierwszego rzędu	539
8.1.6. Reakcje drugiego rzędu	544
8.1.7. Metody wyznaczania rzędu reakcji	550
8.1.8. Autokatalityczna reakcja drugiego rzędu	551
8.1.9. Wpływ temperatury na szybkość reakcji chemicznej. Równanie Arrheniusa	555
8.1.10. Kinetyka reakcji enzymatycznych	560
Równania Michaelisa-Menten i Lineweavera-Burka	560
8.2. Mechanizmy reakcji chemicznych - <i>Przemysław Łoś, Emil Ratajczak</i>	564
8.2.1. Pojęcia ogólne	564
8.2.2. Wolne rodniki	569
Metody otrzymywania	570
Typy reakcji wolnych rodników	575
Wolne rodniki w chemii atmosfery	581
8.3. Elementy farmakokinetyki - <i>Joanna Szymura-Oleksiak</i>	584

8.3.1. Definicja farmakokinetyki	584
8.3.2. Parametry farmakokinetyczne	585
Dostępność biologiczna	586
Objętość dystrybucji	586
Klirens	587
Biologiczny okres półtrwania	587
8.3.3. Modele kompartmentowe	588
Opis kinetyki zmian stężenia leku we krwi po jego podaniu dożylnym w jednorazowej dawce	589
Opis kinetyki zmian stężenia leku we krwi po jednorazowym podaniu pozanaczyniowym. Otwarty model jednokompartментowy	600
8.3.4. Fizjologiczne modele przepływowe	607
Wiązanie się leku z białkami	611
8.3.5. Farmakokinetyka niezależna od modelu	614
8.3.6. Farmakokinetyka liniowa i nieliniowa	617
8.3.7. Stan stacjonarny	619
Wlew dożylny leku	619
Opis kinetyki zmian stężenia leku we krwi po wielokrotnym podaniu pozanaczyniowym	621
Piśmiennictwo	622

9. Elementy radiofarmacji, fotochemii i chemii radiacyjnej

- <i>Aleksander Kufelnicki, Marian J. Surma</i>	624
9.1. Radiofarmacja - <i>Aleksander Kufelnicki, Marian J. Surma</i>	624
9.1.1. Pojęcia podstawowe	624
9.1.2. Jądro atomowe	625
9.1.3. Promieniotwórczość naturalna i sztuczna	627
9.1.4. Prawo rozpadu promieniotwórczego	628
9.1.5. Aktywność nuklidu promieniotwórczego	629
9.1.6. Rozpady promieniotwórcze	631
Rozpad α	631
Rozpad β	632
Promieniowanie γ , konwersja wewnętrzna, izomeria jądrowa	636
9.1.7. Oddziaływanie promieniowania jonizującego z materią	639
Oddziaływanie promieniowania α	641
Oddziaływanie promieniowania β	642
Oddziaływanie fotonów	644
9.1.8. Zastosowania terapeutyczne i diagnostyczne radiofarmaceutyków	649
9.1.9. Przygotowanie radiofarmaceutyków	651
9.1.10. Wybrane detektory promieniowania jonizującego	654
Emulsja fotograficzna	654
Licznik Geigera-Müllera	655
Licznik scyntylacyjny	657
9.2. Elementy fotochemii - <i>Aleksander Kufelnicki</i>	660
9.2.1. Energia promieniowania	660

9.2.2. Reakcje fotochemiczne	661
9.2.3. Podstawowe prawa fotochemiczne	662
9.2.4. Wydajność kwantowa reakcji fotochemicznych	662
9.2.5. Ochrona preparatów farmaceutycznych	664
9.2.6. Proces widzenia a fotochemia	665
9.3. Elementy chemii radiacyjnej - <i>Aleksander Kufelnicki,</i> <i>Marian J. Surma</i>	666
9.3.1. Charakterystyka procesów radiacyjnych	666
9.3.2. Biologiczne skutki promieniowania jonizującego	669
9.3.3. Dozymetria	670
9.3.4. Wykorzystanie chemii radiacyjnej w farmacji	672
Piśmiennictwo	672
Skorowidz	674

oprac. BPK