

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Spektroskopia</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	chemia środków bioaktywnych i kosmetyków
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Spektroskopia
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	45,0
Nauczyciel:	<b>Borowski Piotr, dr hab.</b>
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	średnio zaawansowany
Wstępne wymagania:	podstawy fizyki, chemii fizycznej i chemii kwantowej
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"><li>• ćwiczenia przedmiotowe</li><li>• objaśnienie lub wyjaśnienie</li><li>• pokaz</li></ul>

### **Podstawy spektroskopii molekularnej**

- podstawowe stałe fizyczne
- pole elektryczne i magnetyczne
- promieniowanie elektromagnetyczne
- podstawowe jednostki stosowane w spektroskopii i ich przeliczanie
- formy energii cząsteczek i ich kwantyzacja
- widmo: definicja, powstawanie, podział widm, prawdopodobieństwa przejść spektralnych, reguły wyboru
- poszerzenie pasm spektralnych, tło, szum i intensywność integralna

### **Podstawy modelowania struktury cząsteczki**

- numeryczna minimalizacja funkcji – przykłady
- przegląd typowych pakietów do obliczeń kwantowochemicznych
- przykłady optymalizacji geometrii cząsteczki na poziomach MM i półempirycznych
- geometrie obliczone vs. eksperymentalne
- korelacje między strukturą cząsteczki a jej parametrami geometrycznymi

### **Spektroskopia oscylacyjna**

- cząsteczki dwuatomowe: krzywa energii potencjalnej, równowagowa długość wiązania, granica i energia dysocjacji
- cząsteczki wieloatomowe: współrzędne wewnętrzne, (hiper)powierzchnia energii potencjalnej, geometria równowagowa cząsteczki
- jednowymiarowy oscylator harmoniczny, ujęcie klasyczne i kwantowe
- widmo oscylacyjne cząsteczki w przybliżeniu harmonicznym (stała siłowa, reguły wyboru)
- anharmoniczność i jej wpływ na widmo oscylacyjne (reguły wyboru)
- cząsteczki wieloatomowe: oscylacyjne stopnie swobody, drgania normalne grupowe
- podstawy spektroskopii IR: drgania aktywne i nieaktywne w podczerwieni
- podstawy spektroskopii Ramana: drgania aktywne i nieaktywne
- typy przejść w spektroskopii oscylacyjnej
- układy jedno- i dwuwiązkowe, techniki CW i FT
- spektrometr IR
- spektrometr Ramana
- rejestracja widm oscylacyjnych próbek stałych, ciekłych i gazowych
- interpretacja widm oscylacyjnych: podstawowe zakresy na widmie oscylacyjnym, drgania grupowe dla podstawowych klas związków organicznych (nazwy, notacja), tabele korelacyjne, wpływ wiązania wodorowego na widmo oscylacyjne, drgania rozciągające grupy karbonylowej: wpływ efektu indukcyjnego i mezomerycznego na położenie pasma, określanie charakteru związku chemicznego i, jeśli to możliwe, jego struktury na podstawie widm oscylacyjnych (różnorodne ćwiczenia)
- komplementarność technik IR i Ramana (różnorodne ćwiczenia)

### **Spektroskopia NMR**

- pole magnetyczne
- spin jądra: kwantyzacja, liczby kwantowe  $M_I$
- moment magnetyczny jądra, współczynnik magnetogiryczny
- istota jądrowego rezonansu magnetycznego, częstość Larmora
- ekranowanie jąder: mechanizmy ekranowania, stała ekranowania, równocенność chemiczna jąder
- przesunięcie chemiczne, wzorce wewnętrzne
- widm NMR cząsteczki (informacje odczytywane i ich znaczenie)
- spektrometr NMR
- metodologia pomiarów: wpływ wartości indukcji na widmo, całkowanie sygnały i inne aspekty
- sprzężenie spinowo-spinowe, multiplety
- spektroskopia  $^1\text{H}$  NMR: podstawy: zalety i wady, widmo  $^1\text{H}$  NMR i jego składowe, gęstość elektronowa i inne czynniki wpływające na przesunięcie chemiczne (efekt indukcyjny i mezomeryczny itd.), tabele korelacyjne, liczba sygnałów na widmie NMR: protony (grupy protonów) homo-, enancio-, diastereo- i heterotopowe, wyznaczanie stałych sprzężenia spinowo-spinowego, równocенność magnetyczna jąder, rząd widma  $^1\text{H}$  NMR, konwencja Pople'a oznaczeń (np. AX, AB etc.), efekt daszkowy, wpływ efektów dynamicznych na kształt widma  $^1\text{H}$  NMR, sprzężenie wirtualne, wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie widma  $^1\text{H}$  NMR (różnorodne ćwiczenia)
- spektroskopia  $^{13}\text{C}$  NMR: podstawy, odprężanie protonów (intensywności integralne), liczba sygnałów na widmie  $^{13}\text{C}$  NMR vs. symetria cząsteczki, ekranowanie jąder  $^{13}\text{C}$ , tabele korelacyjne, wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie widma  $^{13}\text{C}$  NMR (różnorodne ćwiczenia)
- dwuwymiarowa spektroskopia NMR – rozwiązywanie podstawowych problemów strukturalnych z wykorzystaniem technik  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  COSY,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  HETCOR, HMQC, INADEQUATE

### **Spektroskopia elektronowa**

- teoria orbitali molekularnych – powtórka
- spektrometry i metodologia
- typy przejść elektronowych, reguły wyboru
- chromofory (różnorodne ćwiczenia dotyczące intuicyjnego wyznaczania długości fal, które mogą być absorbowane przez różne cząsteczki)
- fluorescencja i fosforescencja
- różnorodne ćwiczenia nad zastosowaniem spektroskopii elektronowej w analizie ilościowej

Zakres tematów:

Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"><li>• ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)</li><li>• śródsesestralne pisemne testy kontrolne</li></ul>
Literatura:	<p>Atkins P. W., <i>Chemia fizyczna</i>, PWN, Warszawa 2001.</p> <p>Borowski P., <i>Wybrane zagadnienia spektroskopii molekularnej</i>, Wydawnictwo UMCS, Lublin 2005.</p> <p>Kęcki Z., <i>Podstawy spektroskopii molekularnej</i>, PWN, Warszawa 1998.</p> <p><i>Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych</i>, (red. Zieliński W., Rajca A.), WNT, Warszawa 2000.</p> <p>Sadlej J., <i>Spektroskopia molekularna</i>, WNT, Warszawa 2002.</p> <p>Silverstein R. M., Webster F. X., Kiemle D. J., <i>Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych</i>, PWN, Warszawa 2007.</p>