

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Spektroskopia</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	chemia środków bioaktywnych i kosmetyków
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	<b>Patrykiewicz Andrzej, prof. dr hab.</b>
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Punkty ECTS:	4,0
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu
Poziom trudności:	średnio zaawansowany
Wstępne wymagania:	podstawy fizyki, chemii fizycznej i chemii kwantowej
Metody dydaktyczne:	• wykład informacyjny
Zakres tematów:	<p><b>Podstawy spektroskopii.</b>Promieniowanie elektromagnetyczne, intensywność. Formy energii molekuł. Kwantyzacja energii. Widmo (powstawanie, podział), techniki rejestracji (CW, FT – podstawy), podstawowa aparatura. Reguły wyboru. Rozmycie pasm. Równowaga termodynamiczna obsadzeń poziomów. Podstawy analizy jakościowej i ilościowej.</p> <p><b>Podstawy modelowania struktury cząsteczki.</b>Współrzędne wewnętrzne, wybór. Krzywa i (hiper)powierzchnia energii potencjalnej. Geometria równowagowa cząsteczki. Iteracyjne wyznaczanie geometrii równowagowej cząsteczki w ramach danego przybliżenia kwantowochemicznego – podstawy. Pola siłowe cząsteczki i ich związek ze strukturą.</p> <p><b>Spektroskopia oscylacyjna.</b>Jednowymiarowy oscylator harmoniczny (reguły wyboru, widmo). Anharmoniczność (reguły wyboru). Drgania normalne i grupowe (podział, przykłady). Podstawy spektroskopii IR i Ramana – typy przejść oscylacyjnych, reguły wyboru, metodyka pomiarów. Aktywność drgań normalnych w spektroskopii IR i Ramana. Drgania grupowe podstawowych klas związków organicznych. Zastosowania spektroskopii oscylacyjnej w analizie jakościowej związków organicznych. Wpływ wiązania wodorowego na widmo oscylacyjne. Rotacyjna struktura subtelna pasm oscylacyjnych – widma oscylacyjno-rotacyjne.</p> <p><b>Spektroskopia NMR.</b>Spin jądra. Moment magnetyczny jądra i jego oddziaływanie z polem magnetycznym. Istota jądrowego rezonansu magnetycznego. Ekranowanie jąder – mechanizmy, magnetyczna stała ekranowania, widmo NMR. Przesunięcia chemiczne, wzorce. Sprzężenia spinowo-spinowe, stała sprzężenia.</p> <p>Metodyka pomiarów – wpływ siły pola magnetycznego, krzywa całkowita itd. Spektroskopia <math>^1\text{H}</math> NMR: przesunięcia chemiczne, liczba sygnałów na widmie, struktury multipletowe sygnałów. Zastosowania spektroskopii <math>^1\text{H}</math> NMR w analizie związków organicznych. Widmo <math>^1\text{H}</math> NMR a wiązanie wodorowe, wpływ efektów dynamicznych na widmo <math>^1\text{H}</math> NMR. Spektroskopia <math>^{13}\text{C}</math> NMR: podstawy, odsprężanie protonów, przesunięcia chemiczne, liczba sygnałów na widmie, przykłady widm. Widma off-resonance i DEPT.</p> <p>Dwuwymiarowa (2D) spektroskopia NMR (widma <math>^1\text{H}</math>, <math>^1\text{H}</math> COSY, <math>^1\text{H}</math>, <math>^{13}\text{C}</math> HETCOR, HMQC, INADEQUATE): podstawy, informacje strukturalne zawarte w widmach 2D.</p> <p><b>Spektroskopia elektronowa.</b>Przejścia elektronowe w atomach i cząsteczkach – reguły wyboru. Metodyka pomiarów. Widma elektronowe prostych cząsteczek. Zastosowania spektroskopii elektronowej w analizie związków organicznych: chromofory, auksochromy. Przykłady widm związków z grupami: C=C, C=O, OH, NO<sub>2</sub> itp. Luminescencja. Wykorzystanie spektroskopii elektronowej w analizie ilościowej – przykłady.</p> <p><b>Spektrometria masowa.</b>Fizyczne podstawy metody. Wybrane metody jonizacji badanych substancji (EI, CI, SIMS, FD, FAB, MALDI i inne). Wybrane analizatory (analizator magnetyczny, kwadrupolowy, czasu przelotu, pułapka jonowa). Metodyka pomiarów. Drogi fragmentacji jonów. Widma masowe niektórych grup związków chemicznych. Zastosowanie spektrometrii masowej (wyznaczanie masy cząsteczkowej i wzoru sumarycznego badanego związku).</p> <p><b>Inne metody spektralne.</b>Widma rotacyjne, widma EPR i inne.</p>
Forma oceniania:	• końcowe zaliczenie pisemne

Atkins P. W., *Chemia fizyczna*, PWN, Warszawa 2001.

Borowski P., *Wybrane zagadnienia spektroskopii molekularnej*, Wydawnictwo UMCS, Lublin 2005.

Kęcki Z., *Podstawy spektroskopii molekularnej*, PWN, Warszawa 1998.

Literatura: *Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych*, (red. Zieliński W., Rajca A.), WNT, Warszawa 2000.

Sadlej J., *Spektroskopia molekularna*, WNT, Warszawa 2002

Silverstein R. M., Webster F. X., Kiemle D. J., *Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych*, PWN, Warszawa 2007.