

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Metody spektroskopowe
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	analityka chemiczna
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Metody spektroskopowe
Rok/Semestr:	III/5
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	Borowski Piotr, dr hab.
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	egzamin
Punkty ECTS:	5,0
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	10,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 30,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 30,0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 40,0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 40,0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu
Poziom trudności:	podstawowy
Wstępne wymagania:	podstawy fizyki, chemii fizycznej i chemii kwantowej
Metody dydaktyczne:	• konsultacje • objaśnienie lub wyjaśnienie • wykład informacyjny
Zakres tematów:	Podstawy spektroskopii. Promieniowanie elektromagnetyczne, intensywność. Formy energii molekuł. Kwantyzacja energii. Widmo (powstawanie, podział), techniki rejestracji (CW, FT – podstawy), podstawowa aparatura. Reguły wyboru. Rozmieszczenie pasm. Równowaga termodynamiczna obszarów poziomów. Podstawy analizy jakościowej i ilościowej. Spektroskopia oscylacyjna. Krzywa i (hiper)powierzchnia energii potencjalnej. Geometria równowagowa cząsteczki. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny (widmo). Anharmoniczność. 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. Efekt indukcyjny i mezomeryczny oraz jego wpływ na częstość drgań wiązań wielokrotnych. Rotacyjna struktura subtelna pasm oscylacyjnych – widma oscylacyjno-rotacyjne. Spektroskopia NMR. Spin jądra. Moment magnetyczny jądra i jego oddziaływanie z polem magnetycznym. Istota jądrowego rezonansu magnetycznego. Ekranowanie jąder – mechanizmy, magnetyczna stała ekranowania, widmo NMR. Przesunięcie chemiczne, wzorce. Sprzężenia spinowo-spinowe, stała sprzężenia. Metodyka pomiarów – wpływ siły pola magnetycznego, krzywa całkowita itd. Spektroskopia ^1H NMR: przesunięcia chemiczne, liczba sygnałów na widmie, struktury multipletowe sygnałów. Zastosowania spektroskopii ^1H NMR w analizie związków organicznych. Widmo ^1H NMR a wiązanie wodorowe, wpływ efektów dynamicznych na widmo ^1H NMR. Spektroskopia ^{13}C NMR: podstawy, odsprężanie protonów, metoda off-resonance i DEPT, przesunięcia chemiczne, liczba sygnałów na widmie, przykłady widm. Spektroskopia elektronowa. 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: $\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{O}$, OH, NO_2 itp. Luminescencja. Wykorzystanie spektroskopii elektronowej w analizie ilościowej – przykłady. Spektrometria masowa. Fizyczne podstawy metody. Wybrane metody jonizacji badanych substancji (EI, CI, SIMS, FD, FAB, MALDI i inne). Wybrane analizatory (analizator magnetyczny, kwadruipolowy, 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). Inne metody spektralne. Krótkie wprowadzenie.
Forma oceniania:	• egzamin ustny
Warunki zaliczenia:	Na egzaminie Student będzie odpowiadał z podstaw fizykochemicznych metod spektroskopowych, jak również otrzyma do widmo/widma, które będzie musiał zinterpretować na podstawie udostępnionych tabel korelacyjnych.

Literatura:	Atkins P. W., <i>Chemia fizyczna</i>, PWN, Warszawa 2001. Borowski P., <i>Wybrane zagadnienia spektroskopii molekularnej</i>, Wydawnictwo UMCS, Lublin 2005. Kęcki Z., <i>Podstawy spektroskopii molekularnej</i>, PWN, Warszawa 1998. <i>Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych</i>, (red. Zieliński W., Rajca A.), WNT, Warszawa 2000. Sadlej J., <i>Spektroskopia molekularna</i>, WNT, Warszawa 2002. Silverstein R. M., Webster F. X., Kiemle D. J., <i>Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych</i>, PWN, Warszawa 2007.
Modułowe efekty kształcenia:	01 Podać schemat spektrometrów CW i FT, omówić ich zasadę działania, zalety i wady 02 Omówić zasadę działania spektrometrów jedno- i dwuwiązkowych, ich zalety i wady 03 Podać i scharakteryzować typowe układy jonizacji próbek i analizatory wykorzystywane w spektrometrii masowej 04 Omówić elementarne podstawy fizykochemiczne wybranych technik spektralnych i analizować widma różnego typu posługując się fachową terminologią charakterystyczną dla danej techniki 05 Omówić widma typowych związków w świetle ogólnych praw obowiązujących w chemii organicznej 06 Omówić fizykochemiczne aspekty wybranych technik spektralnych w świetle praw fizyki i chemii kwantowej 07 Wymienić podstawowe informacje (w tym strukturalne) uzyskiwane w ramach wybranych technik spektralnych 08 Samodzielnie interpretować wybrane widma prostych związków organicznych i wnioskować na temat struktury tych związków