

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Spektroskopia
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2012
Specjalność:	fizykochemiczno-teoretyczna
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Spektroskopia
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	Borowski Piotr, dr hab.
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Punkty ECTS:	3,0
Poziom trudności:	podstawowy
Wstępne wymagania:	podstawy fizyki, chemii fizycznej i chemii kwantowej
Metody dydaktyczne:	• wykład informacyjny
Zakres tematów:	<p>Podstawy spektroskopii.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>Spektroskopia IR.Krzywa i (hiper)powierzchnia energii potencjalnej. Geometria równowagowa cząsteczki. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny (reguły wyboru, widmo). Anharmoniczność (reguły wyboru). Drgania normalne i grupowe (podział, przykłady). Podstawy spektroskopii IR – typy przejść oscylacyjnych, reguły wyboru, metodyka pomiarów. Aktywność drgań normalnych w spektroskopii IR. Drgania grupowe podstawowych klas związków organicznych. Zastosowania spektroskopii IR w analizie jakościowej związków organicznych. Wpływ wiązania wodorowego na widmo IR.</p> <p>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, przesunięcia chemiczne, liczba sygnałów na widmie, przykłady widm.</p> <p>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: C=C, C=O, OH, NO₂ itp. Luminescencja. Wykorzystanie spektroskopii elektronowej w analizie ilościowej – przykłady.</p> <p>Spektrometria masowa.Fizyczne podstawy metody. Wybrane metody jonizacji badanych substancji (EI, CI, SIMS, FD, FAB, MALDI i inne). Wybrane analizatory (analyzer 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>
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.

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.

Wiedza:

Omówienie podstaw fizykochemicznych każdej z technik spektralnych i definiowanie podstawowych pojęć.

Literatura: Scharakteryzowanie podstawowych informacji uzyskiwanych w ramach każdej z technik spektralnych.

Wybieranie metody spektralnej w zależności od potrzeb analitycznych.

Umiejętności:

Odczytywanie podstawowych informacji z różnego typu widm.

Interpretowanie widm IR, NMR i masowych typowych związków organicznych.

Identyfikowanie (określanie struktury) związków jedno- i wielofunkcyjnych na podstawie kompletu widm.

Postawy:

Umiejętność pracy w grupach.

Kreatywność przy rozwiązywaniu problemów strukturalnych.

Świadomość wiodącego charakteru technik spektralnych w rozwiązywaniu problemów strukturalnych.