

# Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Spektroskopia</b>
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	chemia środków bioaktywnych i kosmetyków
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Spektroskopia
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	<b>Borowski Piotr, dr hab.</b>
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Punkty ECTS:	4,0
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	15,0 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 30,0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 15,0 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, kwadropolowy, 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:	• śródsesemestralne pisemne testy kontrolne

Warunki zaliczenia:	W trakcie semestru odbędą się 4 zapowiedziane pisemne kolokwia (25 pkt. każde). Mogą odbywać się również będą krótkie, niezapowiedziane kartkówki pod koniec wykładu. Do zaliczenia potrzebne będzie uzyskanie 50 punktów. Oceny w zależności od uzyskanych punktów są następujące: 50-59 pkt. - dst, 60-69 pkt. - dst+, 70-79 pkt. - db, 80-89 pkt. - db+, 90-100 pkt. - bdb.
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>
Modułowe efekty kształcenia:	<ol style="list-style-type: none"> <li>01 Omówić następujące techniki spektralne: spektroskopia IR, Ramana, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR, spektrometria masowa</li> <li>02 Interpretować widma związków chemicznych o umiarkowanym stopniu złożoności i wnioskować na temat ich struktury</li> <li>03 Powiązać strukturę elektronową cząsteczek z jej właściwościami spektroskopowymi</li> <li>04 Wskazać wpływ oddziaływań międzycząsteczkowych na widma różnego typu</li> <li>05 Wnioskować na temat oddziaływań międzycząsteczkowych na podstawie widm</li> <li>06 Omówić podstawy fizykochemiczne najważniejszych technik spektralnych</li> <li>07 Posługiwać się fachową terminologią właściwą dla danej techniki spektralnej, tak w odniesieniu do podstaw metody, jak i interpretacji widm</li> <li>08 Omówić zasadę działania najważniejszych spektrometrów: IR, Ramana, NMR i spektrometrów masowych (w świetle praw fizyki i chemii kwantowej) i podać podstawowe aspekty metodologiczne</li> <li>09 Określić informacje dostępne w spektroskopii IR, Ramana, NMR i masowej oraz odczytywać je z widm</li> <li>10 Interpretować najprostsze widma 2D NMR</li> <li>11 Samodzielnie zaplanować prostą analizę spektralną nowo otrzymanego związku w zależności od założonych celów</li> <li>12 Interpretować widma IR, Ramana, NMR i masowe (każde indywidualnie i wszystkie kolektywnie, wskazując przy tym korelacje między widmami) oraz wnioskować na temat struktury związków chemicznych na ich podstawie</li> <li>13 Określić charakter związku chemicznego na podstawie widm IR i Ramana</li> <li>14 Podać podstawowe informacje strukturalne na podstawie widm NMR i masowych</li> <li>15 Omówić widma typowych związków w świetle ogólnych praw obowiązujących w chemii organicznej</li> <li>16 Omówić fizykochemiczne aspekty technik spektralnych w świetle praw fizyki i chemii kwantowej</li> <li>17 W razie potrzeby wnioskować (w sposób uproszczony) na temat badanego układu na podstawie innych technik spektralnych (np. <sup>14</sup>N, <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P itd. NMR) po uprzednim samodzielnym zapoznaniu się ze stosowną literaturą</li> </ol>