

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Spektroskopia
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:	45,0
Nauczyciel:	Borowski Piotr, dr hab.
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">• ćwiczenia przedmiotowe• objaśnienie lub wyjaśnienie• pokaz

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 i 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 ^1H NMR: podstawy: zalety i wady, widmo ^1H 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 ^1H NMR, konwencja Pople'a oznaczeń (np. AX, AB etc.), efekt daszkowy, wpływ efektów dynamicznych na kształt widma ^1H NMR, sprzężenie wirtualne, wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie widma ^1H NMR (różnorodne ćwiczenia)
- spektroskopia ^{13}C NMR: podstawy, odprężanie protonów (intensywności integralne), liczba sygnałów na widmie ^{13}C NMR vs. symetria cząsteczki, ekranowanie jąder ^{13}C , tabele korelacyjne, wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie widma ^{13}C NMR (różnorodne ćwiczenia)
- dwuwymiarowa spektroskopia NMR – rozwiązywanie podstawowych problemów strukturalnych z wykorzystaniem technik ^1H , ^1H COSY, ^1H , ^{13}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"> • ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność) • śródsesemestralne pisemne testy kontrolne
Warunki zaliczenia:	<p>W trakcie semestru odbędą się zapowiedziane pisemne kolokwia. Do zaliczenia potrzebna będzie połowa uzyskanych punktów. Oceny w zależności od uzyskanych punktów są następujące: 50-59% - dst, 60-69% - dst+, 70-79% - db, 80-89% - db+, 90-100% - bdb. Przewidziane są również niezapowiedziane kartkówki z bieżących zagadnień z możliwością uzyskania punktów ujemnych. Ocenie podlegać będzie również przygotowanie Studenta do ćwiczeń i Jego aktywność na ćwiczeniach. Prowadzący może podnieść ocenę o 0.5 (tj. o plus) na podstawie własnej oceny aktywności Studenta.</p>
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"> 01 Omówić następujące techniki spektralne: spektroskopia IR, Ramana, ¹H i ¹³C NMR, spektrometria masowa 02 Interpretować widma związków chemicznych o umiarkowanym stopniu złożoności i wnioskować na temat ich struktury 03 Powiązać strukturę elektronową cząsteczek z jej właściwościami spektroskopowymi 04 Wskazać wpływ oddziaływań międzycząsteczkowych na widma różnego typu 05 Wnioskować na temat oddziaływań międzycząsteczkowych na podstawie widm 06 Omówić podstawy fizykochemiczne najważniejszych technik spektralnych 07 Posługiwać się fachową terminologią właściwą dla danej techniki spektralnej, tak w odniesieniu do podstaw metody, jak i interpretacji widm 08 Omówić zasadę działania najważniejszych spektrometrów: IR, Ramana, NMR i spektrometrów masowych (w świetle praw fizyki i chemii kwantowej) i podać podstawowe aspekty metodologiczne 09 Określić informacje dostępne w spektroskopii IR, Ramana, NMR i masowej oraz odczytywać je z widm 10 Interpretować najprostsze widma 2D NMR 11 Samodzielnie zaplanować prostą analizę spektralną nowo otrzymanego związku w zależności od założonych celów 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 13 Określić charakter związku chemicznego na podstawie widm IR i Ramana 14 Podać podstawowe informacje strukturalne na podstawie widm NMR i masowych 15 Omówić widma typowych związków w świetle ogólnych praw obowiązujących w chemii organicznej 16 Omówić fizykochemiczne aspekty technik spektralnych w świetle praw fizyki i chemii kwantowej 17 W razie potrzeby wnioskować (w sposób uproszczony) na temat badanego układu na podstawie innych technik spektralnych (np. ¹⁴N, ³¹P itd. NMR) po uprzednim samodzielnym zapoznaniu się ze stosowną literaturą