

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Spectroscopy
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	materials chemistry
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Spectroscopy
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
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	10,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 15,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 25,0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 25,0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 15,0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu
Poziom trudności:	podstawowy
Wstępne wymagania:	fundamentals of physics, physical chemistry and quantum chemistry
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> • konsultacje • objaśnienie lub wyjaśnienie • wykład informacyjny
Zakres tematów:	<p>Basis of spectroscopy. Electromagnetic radiation, intensity. Forms of molecular energy. Energy quantization. Spectrum (the origin, classification), experimental techniques (CW, FT – the general ideas), basic apparatus. Selection rules. Band widths. Population of states in thermal equilibrium – Boltzmann distribution. Basis of qualitative and quantitative analysis.</p> <p>IR Spectroscopy. Potential energy curve and (hyper)surface. Equilibrium geometry of a molecule. One-dimensional harmonic oscillator (selection rules, spectrum). Anharmonicity (selection rules). Normal and group vibrations (classification, examples). Fundamentals of IR spectroscopy – types of vibrational transitions, selection rules, methodology. IR-active/inactive vibrations. Group vibrations of the main groups of organic compounds. Applications of IR spectroscopy in the analysis of organic compounds. Hydrogen bonding and its effect on an IR spectrum.</p> <p>NMR spectroscopy. Nuclear spin. Nuclear magnetic moment and its interaction with an external magnetic field. The essence of the nuclear magnetic resonance. Shielding of a nucleus – mechanisms, the magnetic shielding constant, NMR spectrum. Chemical shift, internal standards. Spin-spin coupling and spin-spin coupling constant. Methodology – the effect of a magnetic field strength, integrated curve etc. The ^1H NMR spectroscopy: chemical shifts, the number of signals on the spectrum, the multiplicities of signals. Applications of the ^1H NMR spectroscopy in analysis of organic compounds. Hydrogen bonding and its effect on ^1H NMR spectrum, dynamical effects in NMR. ^{13}C NMR spectroscopy: fundamentals, proton decoupling, chemical shifts, the number of signals on the spectrum, examples of spectra.</p> <p>Electronic spectroscopy. The electronic transitions of atoms and molecules – selection rules. Methodology. Electronic spectra of simple molecules. Applications of electronic spectroscopy in analysis of organic compounds: chromophores, auxochromes. Examples of electronic spectra of C=C, C=O, OH, NO_2 containing compounds. Luminescence. Quantitative analysis – examples.</p> <p>Mass spectrometry. Physical fundamentals. The selected techniques of the sample ionization (EI, CI, SIMS, FD, FAB, MALDI etc.). The selected analyzers (magnetic field deflection analyzer, ion trap, quadrupole mass filter, time of flight analyzer). Methodology. Fragmentation process. Mass spectra of the selected groups of compounds. Applications of mass spectrometry (determination of the molecular weight and empirical formula of a compound).</p>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> • śródsesemestralne pisemne testy kontrolne
Warunki zaliczenia:	There will be written tests during the semester, and occasionally short written tests at the end of some lectures. Half of the maximal number of points will be required to get credit. The grades depend on the number of points received: 50-59% - satisfactory, 60-69% - satisfactory +, 70-79% - good, 80-89% - good +, 90-100% - very good

Literatura:	<p>Atkins P. W., <i>Physical Chemistry</i>, Oxford University Press, 1994 (or later)</p> <p>Borowski P., <i>Selected problems of Molecular Spectroscopy</i>, Wydawnictwo UMCS, Lublin 2005.</p> <p>Kęcki Z., <i>Fundamentals of Molecular Spectroscopy</i>, PWN, Warszawa 1998.</p> <p>Sadlej J., <i>Molecular Spectroscopy</i>, WNT, Warszawa 2002.</p> <p>Silverstein R. M., Webster F. X., Kiemle D. J., <i>Spectrometric Identification of Organic Compounds</i>, John WileySons, Inc. New York, 2005</p>
Modułowe efekty kształcenia:	<ol style="list-style-type: none"> 01 Omówić podstawy następujących technik spektralnych: spektroskopia IR, ¹H i ¹³C NMR, spektrometria masowa 02 Interpretować widma prostych związków chemicznych i wnioskować na temat ich struktury 03 Powiązać strukturę elektronową cząsteczek z jej podstawowymi 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 terminologią właściwą dla danej techniki spektralnej, tak w odniesieniu do podstaw metody, jak i interpretacji widm 08 Omówić zasadę działania spektrometrów CW i FT oraz układów jedno- i dwuwiązkowych 09 Określić informacje dostępne w spektroskopii IR, NMR i masowej oraz odczytywać je z widm 10 Samodzielnie zaplanować analizę spektralną prostego związku w zależności od założonych celów 11 Interpretować proste widma IR, NMR i masowe (każde indywidualnie i wszystkie kolektywnie, wskazując przy tym korelacje między widmami) oraz wnioskować na temat struktury związków chemicznych na ich podstawie 12 Określić charakter związku chemicznego na podstawie widm IR i podać podstawowe informacje strukturalne na podstawie widm NMR i masowych 13 Omówić widma typowych związków w świetle ogólnych praw obowiązujących w chemii organicznej 14 Omówić fizykochemiczne aspekty technik spektralnych w świetle praw fizyki i chemii kwantowej 15 Posługiwać się podstawową angielską terminologią obowiązującą w spektroskopii 16 Korzystać z powszechnie dostępnych podręczników w języku angielskim 17 Samodzielnie interpretować widma prostych związków organicznych i wnioskować na temat struktury tych związków