

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Spektroskopia
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	nieorganiczna
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
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:	podstawy fizyki, chemii fizycznej i chemii kwantowej
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> • konsultacje • objaśnienie lub wyjaśnienie • 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, 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>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> • końcowe zaliczenie pisemne
Warunki zaliczenia:	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.

	<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> <p>Wiedza:</p> <p>Omówienie podstaw fizykochemicznych każdej z technik spektralnych i definiowanie podstawowych pojęć.</p> <p>Literatura: Scharakteryzowanie podstawowych informacji uzyskiwanych w ramach każdej z technik spektralnych.</p> <p>Wybieranie metody spektralnej w zależności od potrzeb analitycznych.</p> <p>Umiejętności:</p> <p>Odczytywanie podstawowych informacji z różnego typu widm.</p> <p>Interpretowanie widm IR, NMR i masowych typowych związków organicznych.</p> <p>Identyfikowanie (określanie struktury) związków jedno- i wielofunkcyjnych na podstawie kompletu widm.</p> <p>Postawy:</p> <p>Umiejętność pracy w grupach.</p> <p>Kreatywność przy rozwiązywaniu problemów strukturalnych.</p> <p>Świadomość wiodącego charakteru technik spektralnych w rozwiązywaniu problemów strukturalnych.</p>
<p>Modułowe efekty kształcenia:</p>	<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 Samodzielnie interpretować widma prostych związków organicznych i wnioskować na temat struktury tych związków