

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:	30,0
Nauczyciel:	Borowski Piotr, dr hab.
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	podstawowy
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

Spektroskopia IR

- 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 IR (reguły wyboru)
- cząsteczki wieloatomowe: oscylacyjne stopnie swobody, drgania normalnegrupowe
- podstawy spektroskopii IR: drgania aktywne i nieaktywne w podczerwieni
- typy przejść w spektroskopii IR
- układy jedno- i dwuwiązkowe, techniki CW i FT
- spektrometr IR
- rejestracja widm IR próbek stałych, ciekłych i gazowych
- interpretacja widm IR: podstawowe zakresy na widmie IR, drgania grupowe dla podstawowych klas związków organicznych (nazwy, notacja), tabele korelacyjne, wpływ wiązania wodorowego na widmo IR, 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 IR (różnorodne ćwiczenia)

Spektroskopia NMR

- pole magnetyczne
- spin jądra: kwantyzacja, liczby kwantowe/oraz 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, 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)

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

Spektrometria masowa

- techniki jonizacji (EI, CI, FAB, FD, MALDI, SIMS itd.)
- dwusektorowy spektrometr (analizator) masowy
- inne typy analizatorów (kwadrupolowy, pułapka jonowa, analizator czasu przelotu)
- proces fragmentacji (istota, przykłady, fragmentacja różnych klas związków organicznych, typowe przegrupowania)
- widmo masowe – typy pików (jonów)
- względne intensywności pików izotopowych na widmie masowym, wyznaczanie i wykorzystanie
- wykorzystanie spektrometrii masowej do określania masy cząsteczkowej związku chemicznego i jego wzoru sumarycznego, regułą azotu
- wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie widma masowego (różnorodne ćwiczenia)

Wyznaczanie struktury związku chemicznego na podstawie kompletu widm IR, NMR i masowego

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 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