Spektroskopia Związków Organicznych

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia	**Cykl dydaktyczny** 2023/24
Specjalność CHEMIA MATERIAŁOWA	**Kod zajęć** 02CHECMS.14S.01934.23
Jednostka organizacyjna Wydział Chemii	**Języki wykładowe** polski
Poziom studiów studia pierwszego stopnia	**Obligatoryjność** Fakultatywny
Forma studiów studia stacjonarne	**Blok zajęciowy** Przedmioty specjalnościowe
Profil studiów profil ogólnoakademicki	

Koordynator zajęć	Adam Huczyński
Prowadzący zajęcia	Adam Huczyński, Daniel Łowicki

Okres	**Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia**	**Liczba punktów ECTS**
Semestr 3	• Wykład: 30, Zaliczenie z oceną • Laboratorium: 30, Zaliczenie z oceną	5

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie wiadomości na temat metod spektroskopowych stosowanych w chemii organicznej oraz przygotowanie do właściwej interpretacji widm EI-MS, NMR, IR, UV-VIS.
C2	Rozwinięcie umiejętności interpretacji widm służących do określania struktury związków organicznych oraz przygotowanie do wyboru właściwej metody badawczej służącej określeniu struktury związków organicznych.
C3	Wyrobienie umiejętności korzystania ze źródeł literaturowych (bazy widm, publikacje naukowe).
C4	Rozwinięcie umiejętności komunikacji i pracy w grupie oraz prezentowania wiedzy z zakresu omawianych problemów.

Wymagania wstępne

Brak wymagań wstępnych.

Efekty uczenia się dla zajęć

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
Wiedzy – Student/ka:			
W1	zna i rozumie podstawy fizyczne metod spektroskopowych (NMR, IR, UV-VIS) oraz spektrometrycznych (EIMS, ESI MS, HRMS), zna zasady doboru czułości aparatu i ograniczenia każdej z metod, zna zasady doboru najwłaściwszej metody analitycznej do określenia struktury związku organicznego.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W03, CHE_K1_W04, CHE_K1_W05, CHE_K1_W08, CHE_K1_W14, CHE_K1_W15, CHE_K1_W17	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
W2	zna i rozumie zasady rządzące interpretacją widm celu jednoznacznego określenia struktury związku organicznego.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W03, CHE_K1_W04, CHE_K1_W05, CHE_K1_W06, CHE_K1_W14, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
W3	zna poglądowy schemat budowy urządzeń analitycznych oraz ich kluczowych elementów i zna i rozumie ich działanie.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W03, CHE_K1_W14, CHE_K1_W15, CHE_K1_W17	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
Umiejętności – Student/ka:			
U1	potrafi analizować widma FT-IR, NMR, MS w celu określenia struktury związku organicznego.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10, CHE_K1_U16, CHE_K1_U17, CHE_K1_U20, CHE_K1_U21, CHE_K1_U22, CHE_K1_U23	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
U2	potrafi krytycznie analizować różne widma i poprawnie je wykonać.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10, CHE_K1_U16, CHE_K1_U17, CHE_K1_U18, CHE_K1_U21, CHE_K1_U22, CHE_K1_U23, CHE_K1_U25, CHE_K1_U27	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
U3	potrafi projektować widma spektroskopowe (przewidywanie przesunięć chemicznych, położenia pasm absorpcyjnych, korzystania z tablic korelacyjnych oraz spektroskopowych baz danych).	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U16, CHE_K1_U17, CHE_K1_U20, CHE_K1_U21, CHE_K1_U22, CHE_K1_U23, CHE_K1_U25, CHE_K1_U27	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
U4	potrafi zaplanować pomiar spektroskopowy (wiedza o ograniczeniach, zaletach, dokładności i czułości poszczególnych metod spektroskopowych).	CHE_K1_U01, CHE_K1_U02, CHE_K1_U03, CHE_K1_U17, CHE_K1_U18, CHE_K1_U19, CHE_K1_U20, CHE_K1_U21	Kolokwium pisemne, Kolokwium ustne, Projekt, Wypowiedź ustna
U5	potrafi korzystać ze źródeł literaturowych, zasobów internetu, podręczników i tabel, także w języku angielskim, potrafi korzystać z chemicznych baz danych.	CHE_K1_U04, CHE_K1_U10, CHE_K1_U19, CHE_K1_U20, CHE_K1_U21	Projekt, Wypowiedź ustna

Treści programowe dla zajęć

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
1.	Znaczenie metod spektroskopowych w chemii organicznej, podstawowe zagadnienia spektroskopii (równanie Plancka, kwantowa i ciągła natura promieniowania elektromagnetycznego, absorpcja, absorbancja, transmitancja, molowy współczynnik absorpcji, prawo Lamberta-Beera, reguły wyboru), stopień nienasycenia związku (DBE) - wzór Pellegriniego.	W1, U2, U4, U5	Wykład, Laboratorium
2.	Podstawowe pojęcia w spektroskopii UV-VIS (reguły rządzące doborem rozpuszczalników, rodzaje przejść elektronowych, schemat poziomów elektronowych, chromofor, auksochrom, przesunięcie batochromowe, przesunięcie hipsochromowe, efekt hipochromowy, efekt hiperchromowy, zależność widma elektronowego od budowy cząsteczki, reguły addytywności i ich zastosowanie do przewidywania widma elektronowego).	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, U5	Wykład, Laboratorium

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
3.	Podstawowe pojęcia w spektroskopii IR: podział promieniowania IR (NIR, MIR, FIR), rodzaje drgań cząsteczkowych rozciągające i deformacyjne (zginające, wahadłowe, skręcające), drgania szkieletowe, metodyka przygotowywania próbek do pomiaru IR i jej wpływ na obraz widma; podstawy teoretyczne spektroskopii IR (model oscylatora harmonicznego, stała siłowa, częstość drgań własnych oscylatora, oscylator anharmoniczny, tony podstawowe, nadtony, rezonans Fermiego); widma IR podstawowych klas związków organicznych (alkany, alkeny, alkiny, benzen i jego pochodne, związki karbonylowe, kwasy karboksylowe i ich pochodne, alkohole, etery, aminy, aminokwasy, związki nitrowe); wpływ budowy związku na jego widmo IR: efekt izotopowy, wiązanie wodorowe, położenia pasma v(C=O) w widmach związków karbonylowych, wpływ podstawników na położenie niektórych pasm absorpcji pochodnych benzenu.	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, U5	Wykład, Laboratorium
4.	Podstawowe pojęcia spektroskopii NMR: Sygnał wzorca, sygnał rozpuszczalnika, multipletowość sygnału, sprzężenie spinowo-spinowe, przesunięcie chemiczne, stała ekranowania, efekt przesłaniania i efekt odsłaniania integracja sygnału, stała sprzężenia J, równocenność chemiczna i magnetyczna jąder, jądra izochronowe, linie satelitarne, protony homotopowe, protony enancjotopowe, protony diastereotopowe; podstawy teoretyczne spektroskopii NMR, pojęcie spinu, liczba spinowa, moment magnetyczny, pole magnetyczne, wpływ pola magnetycznego na ustawienie spinów, rozdzielczość aparatu, pomiar NMR, relaksacja magnetyczna, fizyczne ograniczenia spektroskopii NMR.	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, U5	Wykład, Laboratorium
5.	Metody jonizacji w spektrometrii masowej: EI, ESI-MS, FAB, MALDI, SIMS, LSIMS, CI; podstawowe pojęcia spektrometrii masowej, jon molekularny, pik główny, pik izotopowy, skład elementarny, jony parzysto- i nie parzystoelektronowe, reguła azotowa, rozszczepienie, rozpad indukcyjny, przegrupowanie McLafferty,ego, reakcja retro Dielsa-Aldera, efekt orto; budowa spektrometru masowego, analizatory stosowane w spektrometrach masowych (analizator magnetyczny, analizator elektryczny, analizator kwadrupolowy, analizator czasu przelotu); fragmentacja masowa głównych klas związków organicznych: alkany, alkeny, węglowodory aromatyczne i alkiloaromatyczne, alkohole, fenole, etery, związki karbonylowe, kwasy karboksylowe i ich pochodne, aminy, związki nitrowe, halogenki alkilowe.	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, U5	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Wykład	Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień, Wykład problemowy, Uczenie problemowe (Problem-based learning)

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Laboratorium	Wykład konwersatoryjny, Dyskusja, Uczenie problemowe (Problem-based learning), Metoda ćwiczeniowa, Metoda projektu, Praca w grupach

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunkiem zaliczenia przedmiotu jest pozytywne zdanie egzaminu pisemnego składającego się z 15 pytań testowych jednokrotnego wyboru (maksymalnie 15 pkt.) oraz 5 pytań otwartych (maksymalnie 25 pkt.). Do egzaminu może przystąpić osoba, która uzyskała zaliczenie z laboratorium. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%
Laboratorium	Warunki zaliczenia: • Zadanie domowe - stanowi 10% oceny końcowej • Odpowiedź ustna - stanowi 10% oceny końcowej • 3 kolokwia z MS, IR i NMR stanowią po 10% oceny końcowej każde • Kolokwium końcowe – stanowi 50% oceny końcowej Dozwolone są 2 nieobecności usprawiedliwione. W przypadku nieobecności usprawiedliwionej w dniu zapowiedzianych testów istnieje możliwość napisania testu w terminie konsultacji prowadzącego. W przypadku nieobecności w dniu zapowiedzianej odpowiedzi ustnej nie ma możliwości uzyskania oceny. Warunkiem zaliczenia przedmiotu jest uzyskanie minimum 50% punktów z testu końcowego. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%

Literatura

Obowiązkowa

1. R. M. Silverstein, F. X Webster, D. J. Kiemle „Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych”, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2022
2. W. Danikiewicz' "Spektrometria mas. Podstawy i zastosowania", Wydawnictwo Naukowe PWN, 2020

Dodatkowa

1. E. Pretsch, P. Buhlmann, C. Affolter „Structure Determination of Organic Compounds (Tables of Spectral Data)”, Springer, 2000
2. L. D. Field, S. Strenhell, J.R. Kalaman „Organic Structures from Spectra”, J. Wiley & Sons, Chichester, 2020

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	**Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć**
Wykład	30
Laboratorium	30
Przygotowanie do zajęć	15
Czytanie wskazanej literatury	5
Przygotowanie projektu	10
Przygotowanie do zaliczenia	60
Łączny nakład pracy studenta	**Liczba godzin** 150
Liczba punktów ECTS	**ECTS** 5

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
CHE_K1_U01	Absolwent/ka potrafi stosować terminologię chemiczną zgodną z IUPAC i zaleceniami PTChem
CHE_K1_U02	Absolwent/ka potrafi przedstawić w przystępny sposób zdobytą wiedzę
CHE_K1_U03	Absolwent/ka potrafi określać i uzasadniać właściwości substancji na podstawie jej struktury
CHE_K1_U04	Absolwent/ka potrafi planować przeprowadzenie procesów chemicznych pod względem doboru reagentów i eliminacji tworzących się produktów ubocznych
CHE_K1_U10	Absolwent/ka potrafi interpretować i analizować ilościowy opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_U16	Absolwent/ka potrafi stosować techniki analityczne do wyjaśnienia podstawowych zjawisk chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U17	Absolwent/ka potrafi dobierać metody analizy instrumentalnej do zbadania określonych zjawisk chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U18	Absolwent/ka potrafi wykonywać doświadczenie chemiczne i fizykochemiczne na podstawie opisu
CHE_K1_U19	Absolwent/ka potrafi analizować i opracowywać wyniki badań oraz przygotowywać raport końcowy z prowadzonych eksperymentów chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U20	Absolwent/ka potrafi wykorzystywać bazy danych do pozyskiwania informacji potrzebnych w pracy chemika
CHE_K1_U21	Absolwent/ka potrafi samodzielnie pozyskiwać informacje z literatury zarówno w języku polskim jak i obcym, tablic fizykochemicznych i innych dostępnych źródeł
CHE_K1_U22	Absolwent/ka potrafi przygotowywać konspekt z przeprowadzonych analiz danych literaturowych
CHE_K1_U23	Absolwent/ka potrafi posługiwać się technikami informacyjnymi
CHE_K1_U25	Absolwent/ka potrafi utworzyć opracowanie przedstawiające określony problem chemiczny lub fizykochemiczny i zaproponować jego rozwiązanie
CHE_K1_U27	Absolwent/ka potrafi wykazywać umiejętność poprawnego wnioskowania na podstawie danych z przeprowadzonych eksperymentów chemicznych lub fizykochemicznych oraz źródeł literaturowych
CHE_K1_W01	Absolwent/ka zna i rozumie prawa i zagadnienia chemiczne
CHE_K1_W02	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia fizyki i ich powiązania z prawami chemicznymi
CHE_K1_W03	Absolwent/ka zna i rozumie techniki matematyki wyższej pozwalające na formalny opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_W04	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu nauk przyrodniczych
CHE_K1_W05	Absolwent/ka zna i rozumie mechanizmy podstawowych reakcji chemicznych
CHE_K1_W06	Absolwent/ka zna i rozumie budowę przestrzenną cząsteczek i kryształów
CHE_K1_W08	Absolwent/ka zna i rozumie właściwości chemiczne substancji w zależności od ich budowy/składu
CHE_K1_W14	Absolwent/ka zna i rozumie podstawowe techniki laboratoryjne i analityczne
CHE_K1_W15	Absolwent/ka zna i rozumie podstawowe metody analizy instrumentalnej
CHE_K1_W17	Absolwent/ka zna i rozumie możliwości optymalizacji ekonomicznej procesów chemicznych oraz uwarunkowania prawno-ekonomiczne mające zastosowanie w obszarze nauk chemicznych