

Spektroskopia molekularna

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia Specjalność CHEMIA SĄDOWA Jednostka organizacyjna Wydział Chemii Poziom studiów studia pierwszego stopnia Forma studiów studia stacjonarne Profil studiów profil ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2023/24 Kod zajęć 02CHECSS.14S.01912.23 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Fakultatywny Blok zajęciowy Przedmioty specjalnościowe
Koordynator zajęć	Piotr Przybylski	
Prowadzący zajęcia	Piotr Przybylski	
Okres Semestr 3	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia • Wykład: 15, Zaliczenie z oceną • Laboratorium: 30, Zaliczenie z oceną	Liczba punktów ECTS 4

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie podstawowej wiedzy o sposobach oddziaływania promieniowania elektromagnetycznego z materią oraz zjawiskach absorpcji, emisji i rozpraszania światła.
C2	Przekazanie wiedzy na temat metod absorpcyjnych stosowanych w chemii organicznej.
C3	Przekazanie informacji dotyczących warunków pomiarów spektroskopowych.
C4	Wykształcenie umiejętności interpretacji widm przy określaniu struktury związków organicznych.
C5	Wyrobianie umiejętności korzystania ze źródeł literaturowych i posługiwania się tablicami korelacyjnymi.

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 podstawy metod spektroskopowych, dualistyczną naturę promieniowania elektromagnetycznego i rodzaje przejść energetycznych w cząsteczkach.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne
W2	za sposób przygotowywania próbek i podstawy działania spektrometrów.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne
W3	zna podstawy magnetycznego rezonansu jądrowego oraz warunki uzyskania rezonansu i rejestracji widm dla różnych jąder.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne
W4	zna podstawy spektroskopii korelacyjnej 2D-NMR i interpretacji widma dwuwymiarowe.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne
W5	zna podstawy rejestrowania widm FT-IR i techniki rejestrowania i przygotowywania próbek w różnym stanie skupienia. Zna rodzaje drgań oscylacyjnych i ich możliwe położenia w widmach w podczerwieni.	CHE_K1_W01, CHE_K1_W02, CHE_K1_W15	Kolokwium pisemne
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi łączyć wartości położenia i intensywności pasm absorpcji w widmach UV-Vis ze strukturą cząsteczek.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10	Kolokwium pisemne
U2	potrafi wykorzystać informacje uzyskiwane z widm protonowych i węglowych do interpretacji struktury związków organicznych.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10	Kolokwium pisemne
U3	potrafi posługiwać się tablicami, bazami danych oraz korzystać z innych opracowań naukowych przy interpretacji widm.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10	Kolokwium pisemne
U4	potrafi określać struktury związków organicznych na podstawie interpretacji danych uzyskiwanych z różnych metod spektroskopowych.	CHE_K1_U01, CHE_K1_U03, CHE_K1_U10	Kolokwium pisemne

Treści programowe dla zajęć

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
1.	Sposoby oddziaływania promieniowania elektromagnetycznego z materią, promieniowanie elektromagnetyczne jako fala i jako kwant energii, równanie Plancka, rodzaje przejść energetycznych w cząsteczce, stany swobody, warunki rejestracji widm, przygotowanie próbek w różnych stanach skupienia, dobór rozpuszczalnika, stężenia i rodzaju kuwety, pomiary intensywności pasm, transmitancja i absorbancja, analiza ilościowa, opis działania spektrometrów, poznanie aparatury dostępnej w Środowiskowym Laboratorium Aparatury Chemicznej.	W1, W2, W3, W4, W5, U1, U2, U3, U4	Wykład, Laboratorium
2.	Przejścia elektronowe. Grupy chromoforowe, przesunięcia bathochromowe i hipsochromowe, zależność położenia pasm absorpcji w widmach UV-Vis od struktury cząsteczki układy polienowe i polienonowe, korzystanie z tablic korelacyjnych, kolor i barwa, widma CD.	W1, W2, U1	Wykład, Laboratorium
3.	Rodzaje drgań oscylacyjnych, wstępna interpretacja widm w podczerwieni, przypisanie pasm absorpcji grupom funkcyjnym i fragmentom strukturalnym w cząsteczce, wiązanie wodorowe i procesy asocjacji w analizie widm w podczerwieni. Sposoby rejestracji widm próbek w różnym stanie skupienia (pastylki KBr, ATR, film, roztwór). Widma VCD.	W1, W5, U3, U4	Wykład, Laboratorium
4.	Warunek rezonansu, rejestracja widm protonowego i węglowego rezonansu jądrowego, jądrowy efekt Ovenhausera, wartości przesunięć chemicznych w widmach protonowego magnetycznego rezonansu jądrowego, efekty diamagnetyczne i anizotropowe, korzystanie z tablic, analiza stałych sprzężenia i intensywności sygnałów w widmach H-1 NMR, układy spinowe, widma I- i II-rzędu, równocześnieść chemiczna i magnetyczna protonów i grup protonów oraz analiza konformacyjna, przypisanie wartości przesunięć chemicznych odpowiednim atomom węgla w widmach magnetycznego rezonansu jądrowego C-13.	W2, W3, U2, U3	Wykład, Laboratorium
5.	Techniki dwuwymiarowe w spektroskopii NMR, korzyści i ograniczenia, jakie związane są z poszczególnymi technikami spektroskopowymi.	W1, W4, U2, U4	Wykład, Laboratorium
6.	Interpretacja widm (o zwiększającej się skali trudności) dla poszczególnych metod spektroskopowych, łączne użycie metod spektroskopowych przy identyfikacji i ustalaniu struktury nieznanego związku.	W1, W3, W4, W5, U2, U3, U4	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Wykład	Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień, Wykład konwersatoryjny, Wykład problemowy
Laboratorium	Dyskusja, Metoda analizy przypadków, Uczenie problemowe (Problem-based learning), Rozwiązywanie zadań (np.: obliczeniowych, artystycznych, praktycznych), Metoda ćwiczeniowa, Metoda badawcza (dociekania naukowego)

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunkiem przystąpienia do zaliczenia (kolokwium pisemne) jest uzyskanie oceny pozytywnej z proseminarium. 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	Warunkiem klasyfikacji jest obecność na minimum 60% zajęć. Składowe oceny końcowej z proseminarium: 1. Napisanie trzech kolokwium tematycznych na minimum 50% 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. W. Zieliński, A. Rajca „Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych”, WNT, Warszawa, 2000
2. R.M. Silverstein, F. X. Webster, D.I. Kiemle „Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych”, PWN, Warszawa 2008

Dodatkowa

1. M. Szafran, Z. Dega-Szafran (red.) „Określanie struktury związków organicznych metodami spektroskopowymi. (Tablice i ćwiczenia)”, PWN, Warszawa 1988
2. D.L.Pavia, G.M. Lampman, G.S. Kriz, J.R. Vyvyan „Introduction to spectroscopy”, Brooks/Cole, 2009

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	15
Laboratorium	30
Przygotowanie do zajęć	30

Przygotowanie do zaliczenia	30
Czytanie wskazanej literatury	10
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 115
Liczba punktów ECTS	ECTS 4

* 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_U03	Absolwent/ka potrafi określać i uzasadniać właściwości substancji na podstawie jej struktury
CHE_K1_U10	Absolwent/ka potrafi interpretować i analizować ilościowy opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
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_W15	Absolwent/ka zna i rozumie podstawowe metody analizy instrumentalnej