**Nazwa przedmiotu:**

Spektroskopowe metody badania struktury materii

**Koordynator przedmiotu:**

prof. dr hab. inż. Sergiusz Luliński

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia I stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

4 / rok ak. 2020/2021

**Liczba punktów ECTS:**

4

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

1. godziny kontaktowe 45h, w tym: a) obecność na wykładach - 30h, b) obecność na ćwiczeniach - 15h, 2. zapoznanie się ze wskazaną literaturą - 20h 3. przygotowanie do kolokwiów i egzaminu i obecność na kolokwiach i egzaminie - 35h Razem nakład pracy studenta: 100h, co odpowiada 4 punktom ECTS.

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

1. obecność na wykładach - 30h, 2. obecność na ćwiczeniach - 15h Razem: 45h, co odpowiada 2 punktom ECTS.

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

1. ćwiczenia - 15h Razem: 15h, co odpowiada 1 punktowi ECTS.

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład:  | 30h |
| Ćwiczenia:  | 15h |
| Laboratorium:  | 0h |
| Projekt:  | 0h |
| Lekcje komputerowe:  | 0h |

**Wymagania wstępne:**

brak

**Limit liczby studentów:**

brak

**Cel przedmiotu:**

Po ukończeniu kursu student powinien: mieć ogólną wiedzę teoretyczną i praktyczną na temat spektroskopowych i spektrometrycznych metod badania struktury związków chemicznych: NMR, IR, Raman, MW, UV, MS, potrafić zinterpretować widmo i na podstawie serii widm określić strukturę związku, umieć dokonać analizy rzeczywistych widm oraz wnioskowania na ich podstawie o przebiegu reakcji chemicznych w tym określania składu mieszanin i czystości produktów reakcji, dla związku o określonej strukturze umieć przedstawić widma, na podstawie dostępnych źródeł zapoznać się samodzielnie z wybranym zagadnieniem.

**Treści kształcenia:**

Wykład
1. Ogólne podstawy spektroskopii, 2h
Promieniowanie elektromagnetyczne. Energia cząsteczek. Kwantowanie energii. Obsadzenie poziomów energetycznych. Widmo. Pasmo spektralne i jego parametry. Rodzaje spektroskopii i aparatura do rejestracji widm. Rola metod spektroskopowych w badaniach struktury materii.
2. Spektroskopia elektronowa, 4h
Energia stanów elektronowych. Diagram Jabłońskiego. Wzbudzenie cząsteczki, reguła Francka-Condona, wzbudzony stan singletowy i trypletowy – fluorescencja a fosforescencja. Prawo Lamberta-Beera. Widmo UV-Vis absorpcji i fluorescencji. Zależność widma od struktury i rozpuszczalnika. Zastosowania w analizie właściwości elektronowych materiałów.
3. Spektroskopia oscylacyjna IR i Ramana, 6h
Energia stanów oscylacyjnych. Absorpcja promieniowania. Drgania normalne i częstości grupowe. Spektroskopia Ramana, rozpraszanie promieniowania. polaryzowalność cząsteczki i reguły wyboru. Interpretacja widm oscylacyjnych IR i Ramana. Charakterystyczne częstości grupowe w cząsteczkach związków organicznych. Powiązanie widma ze strukturą cząsteczki. Wpływ asocjacji na widmo IR. Zastosowania.
4. Spektroskopia NMR, 12h
Wiadomości ogólne. Spin, moment pędu i moment magnetyczny jąder. Obsadzenie spinowych poziomów energetycznych. Magnetyczny rezonans jądrowy. Zasada działania i pomiaru spektroskopu NMR, transformacja Fouriera. Ekranowanie jądra. Przesunięcie chemiczne, skale i wzorce, zależności strukturalne. Równocenność chemiczna i magnetyczna jąder 1H. Sprzężenie spinowo-spinowe, układy spinowe. Efekt podstawienia izotopowego. Zjawiska dynamiczne, wiązanie wodorowe. Wyznaczanie struktury związków organicznych na podstawie widm 1H i 13C NMR oraz przewidywanie widm na podstawie znanej struktury. Widma korelacyjne 2D 1H,1H COSY, 1H,13C HSQC. Zastosowania.
5. Spektrometria mas, 6h
Fizyczne podstawy pomiaru widma masowego. Metody jonizacji. Aparatura do pomiaru widm masowych. Spektrometria masowa w badaniach struktury związków chemicznych. Charakterystyczne fragmentacje głównych klas związków. Określanie składu atomowego związku na podstawie widma HR-MS. Zastosowania.

Ćwiczenia
1.Spektroskopia elektronowa. Analiza stanów i przejść elektronowych cząsteczki. Przewidywanie położenia pasma w widmie na podstawie struktury cząsteczki. 2h.
2. Spektroskopia oscylacyjna. Widma układów wieloatomowych, struktura cząsteczki a widmo. Analiza widm IR i Ramana. 2h.
3. Spektroskopia NMR. Określanie struktury cząsteczki na podstawie widma 1H NMR. Przewidywanie widma dla cząsteczki o danej strukturze. Analiza przykładowych widm 1H i 13C NMR oraz widm korelacyjnych. 4h.
4. Spektrometria mas. Analiza widm masowych w powiązaniu ze strukturą cząsteczki. 2h.
5. Rozwiązywanie zagadnień strukturalnych w oparciu o dane spektroskopowe i spektrometrii MS. Wnioskowanie o przebiegu reakcji chemicznych, określanie czystości produktów. 5h.

**Metody oceny:**

Ocena zintegrowana (wykład i ćwiczenia). W ramach ćwiczeń są dwa kolokwia, każde 25 pkt (razem 50) i kolokwium poprawkowe, na którym można poprawić wybrane kolokwium. Po zakończeniu semestru jest egzamin (50 pkt). Są dwa terminy poprawkowe. Razem (za kolokwia i egzamin) 100 pkt. Aby zaliczyć przedmiot na ocenę dostateczną trzeba mieć przynajmniej 50 pkt.

**Egzamin:**

tak

**Literatura:**

W. Kołos, Chemia kwantowa, PWN, Warszawa, 1975 Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1992 R. Silverstein, Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007

**Witryna www przedmiotu:**

ch.pw.edu.pl

**Uwagi:**

brak

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

zna metody spektroskopowe i spektrometryczne stosowane w badaniach dla określenia struktury związku chemicznego

Weryfikacja:

egzamin; kolokwia

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01, K\_W02, K\_W03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W02:**

wie jak przewidzieć widmo związku chemicznego o zadanej strukturze i jak określić strukturę na podstawie serii widm

Weryfikacja:

egzamin; kolokwia

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W05

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

posiada umiejętność korzystania z danych literaturowych, zasobów internetowych i wyników własnych prac potrzebnych do rozwiązania danego zadania

Weryfikacja:

egzamin; kolokwia

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U01, K\_U03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U02:**

potrafi określić strukturę danego związku chemicznego na podstawie dostępnych danych spektroskopowych oraz przewidzieć widmo związku o danej strukturze, porównać i rozróżnić związki na podstawie widm

Weryfikacja:

egzamin; kolokwia

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U09, K\_U10

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

posiada umiejętność pracy indywidualnej studiując wybrane zagadnienie

Weryfikacja:

egzamin; kolokwia

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K02, K\_K06, K\_K01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**