

## METODY BADAŃ STRUKTURALNYCH

Wykład (30 godz.)

- I. **Podstawy spektroskopii** – promieniowanie elektromagnetyczne, poziomy energetyczne w cząsteczce, absorpcja promieniowania, kształt linii, reguły wyboru, zastosowanie transformacji Fouriera w spektroskopii.
- II. **Widma NMR** – właściwości magnetyczne jąder atomowych, podstawy fizyczne metody NMR, przesunięcie chemiczne, sprzężenie spinowo-spinowe, anizotropia magnetyczna grup, interpretacja widm  $^1\text{H}$  NMR, układy spinowe, zależność Karplusa, efekty dynamiczne, NOE, metoda impulsowa rejestracji widm (FT-NMR), widma dwu- wymiarowe (2D-NMR), elementy spektroskopii  $^{19}\text{F}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR oraz innych jąder.
- III. **Spektroskopia w podczerwieni (IR)** – oscylator harmoniczny i anharmoniczny, oscylacje cząsteczek wieloatomowych, drgania normalne, prawdopodobieństwo przejść, częstości grupowe, rejestracja widm IR, interpretacja widm, wiązania wodorowe w IR, widma Ramana.
- IV. **Spektrometria mas (MS)** – podstawy fizyczne pomiaru widma MS, metody jonizacji próbki, rodzaje jonów w MS, określenie masy cząsteczkowej i wzoru sumarycznego, procesy fragmentacji.
- V. **Widma elektronowe (UV-VIS)** – poziomy elektronowe, spektrometry, reguły wyboru, kształt pasma, przejścia wibronowe, proste chromofory, chromofory aromatyczne, wpływ podstawników, efekty steryczne, wpływ środowiska.

**Warunkiem zaliczenia wykładu** jest wysłuchanie wykładów oraz zaliczenie kolokwium (pisemne i ustne) z tematyki wykładu; kolokwium pisemne odbędzie się w dn.

**25 czerwca 2024** (wtorek, godz. i sala zostaną podane w terminie późniejszym)

**Ćwiczenia laboratoryjne (30 godz.)**

Ćwiczenia naukę praktycznej interpretacji widm IR, UV-VIS, NMR, MS oraz widm złożonych.

**Warunkiem zaliczenia laboratorium** jest aktywny udział w ćwiczeniach oraz zaliczenie **trzech** kolokwium **z rozwiązywania widm**, które odbędą się w godzinach wykładów w trybie stacjonarnym w dniach:

NMR	IR	Widma złożone
19 kwietnia 2024	24 maja 2024	14 czerwca 2024

**ZALICZENIE KAŻDEJ CZĘŚCI tzn. wykładu i laboratorium – 60% CAŁKOWITEJ SUMY PUNKTÓW**

**Ocena i zaliczenie przedmiotu – średnia arytmetyczna ocen z laboratorium i wykładu.**

Kurs platforma eNauczanie

<https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/edit.php?id=38111>

MATERIAŁY do wykładu i lab

<https://chem.pg.edu.pl/node/32/dla-studentow/chemia/metody-badan-strukturalnych>

**Literatura:**

1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle "Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych", PWN, Warszawa, 2007.
2. "Spektroskopowe metody badania struktury związków organicznych", praca zbiorowa red. A. Rajca, WNT, Warszawa, 1996 lub 2000.
3. R. M. Silverstein, G. C. Bassler "Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych", PWN, Warszawa, 1970.
4. L. K. Kazicyna, N. B. Kuplarska "Metody spektroskopowe wyznaczania struktury związków organicznych", PWN, Warszawa, 1974
5. R. A.W. Johnstone, M. E. Rose "Spektrometria mas – podręcznik dla chemików i biochemików", PWN, Warszawa, 2001.
6. A. Zschunke "Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w chemii organicznej", PWN Warszawa, 1976.
7. Z. Kęcki "Podstawy spektroskopii molekularnej", PWN, Warszawa, 1972.
8. H. Günther, "Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego", PWN, Warszawa, 1983.