

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 ^1H NMR, układy spinowe, zależność Karplusa, efekty dynamiczne, NOE, metoda impulsowa rejestracji widm (FT-NMR), widma dwu- wymiarowe (2D-NMR), elementy spektroskopii ^{19}F i ^{13}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.

10 czerwca 2024 (poniedziałek, godz. 11.15, s.112A)

Ćwiczenia laboratoryjne (15 godz.)

Ćwiczenia obejmują 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
15 kwietnia 2024	20 maja 2024	03 czerwca 2024

Ćwiczenia w wymiarze 7x2 + 1 godziny tygodniowo będą się odbywały w następujących terminach:

	Środa, s.01.24C Godz. 13.15	Czwartek, s. 27A Godz. 13.15	Wtorek, s.121A Godz. 11.15
NMR	20.03.2024 27.03.2024 10.04.2024	-	19.03.2024 26.03.2024 09.04.2024
IR	-	25.04.2024 09.05.2024	07.05.2024 14.05.2024
MS+ ^{13}C NMR	-	16.05.2024 23.05.2024	21.05.2024 28.05.2024
Teoria	-	06.06.2024	04.06.2024

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=38113>

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, W-wa, 2007; lub R. M. Silverstein, G. C. Bassler "Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych", PWN, W-wa, 1970.

2. "Spektroskopowe metody badania struktury związków organicznych", praca zbiorowa red. A. Rajca, WNT, W-wa, 1996 lub 2000.
3. L. K. Kazicyna, N. B. Kuplerska "Metody spektroskopowe wyznaczania struktury związków organicznych", PWN, W-wa, 1974
4. R. A.W. Johnstone, M. E. Rose "Spektrometria mas – podręcznik dla chemików i biochemików", PWN, W-wa, 2001.
5. Z. Kęcki "Podstawy spektroskopii molekularnej", PWN, Warszawa, 1972.
6. H. Günther, "Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego", PWN, W-wa, 1983.