

Opis przedmiotu			
Kod przedmiotu	1020-TC000-ISP-4004		
Nazwa przedmiotu	Spektroskopowe metody badania struktury materii		
	Spectroscopic methods of studying structure of matter		
Wersja przedmiotu	2021/2022		
A. Usytuowanie przedmiotu w systemie studiów			
Poziom kształcenia	Studia I stopnia		
Forma i tryb prowadzenia studiów	Studia stacjonarne		
Kierunek studiów	Technologia Chemiczna		
Profil studiów	Ogólnoakademicki		
Specjalność	Przedmiot wspólny dla kierunku		
Jednostka prowadząca przedmiot	Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej		
Jednostka realizująca przedmiot (zlecenia międzywydziałowe)	Nie dotyczy		
Koordinator przedmiotu	prof. dr hab. inż. Sergiusz Luliński		
B. Ogólna charakterystyka przedmiotu			
Przynależność do grupy/bloku przedmiotów	Przedmioty kierunkowe		
Poziom przedmiotu	Poziom podstawowy		
Status przedmiotu	Przedmiot obowiązkowy		
Język prowadzenia zajęć	polski		
Usytuowanie przedmiotu w planie zajęć - semestr nominalny	4		
Usytuowanie realizacji przedmiotu w roku akademickim	semestr letni		
Wymagania wstępne - formalne	Brak		
Limit liczby studentów	Brak		
C. Efekty uczenia się i sposób prowadzenia zajęć			
Cel przedmiotu	Zapoznanie studenta z ogólną wiedzą teoretyczną i wybranymi aspektami praktycznymi spektroskopii molekularnej NMR, IR, Raman, UV-Vis i spektrometrii mas pod kątem określania struktury związków chemicznych.		
	To acquaint students with the general knowledge and selected practical aspects of molecular spectroscopy (NMR, IR, Raman, UV-Vis) and mass spectrometry for determination of structure of chemical compounds.		
Efekty uczenia się (z podziałem na W, U i KS) wraz z odniesieniem do efektów uczenia się dla obszaru i kierunku			
<i>Nr efektu</i>	<i>Opis efektu</i>	<i>Odniesienie do charakterystyk efektów uczenia się</i>	<i>Odniesienie do efektów uczenia się w programie</i>
Zakładane efekty uczenia się w zakresie wiedzy			
W01	Zna metody spektroskopii molekularnej i spektrometrii mas stosowane w badaniach dla określenia struktury związku chemicznego	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W03
	The student knows molecular spectroscopy and mass spectrometry methods used for determination of a structure of a chemical compound		
W02	Wie jak przewidzieć widmo związku chemicznego o zadanej strukturze i jak określić strukturę na podstawie zestawu danych spektroskopowych	I.P6S_WG.o	K_W05
	The student knows how to predict a spectrum of a chemical compound based on its structure and how to determine the structure based on a set of spectroscopy data		
Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności			

U01	posiada umiejętność korzystania z danych literaturowych, zasobów internetowych i wyników własnych prac potrzebnych do rozwiązania danego zadania	I.P6S_UW.o I.P6S_UK III.P6S_UW.o	K_U01		
	The student effectively uses literature data and Web resources concerning a studied question				
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	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U17		
	The student is able; a) to determine of a structure of a chemical compound using available spectroscopic data, b) to predict the spectrum of a given compound, c) to compare and identify compounds based on the spectra				
U03	Posiada umiejętność pracy indywidualnej studiując wybrane zagadnienie	I.P6S_UU	K_U26		
	The student is able to work independently when studying the chosen problem				
<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych</i>					
KS01	Uznaje znaczenie wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych związanych z przedmiotem	I.P6S_KK	K_K01		
	The student recognizes the importance of knowledge for solving cognitive and practical problems related to the subject				
Forma zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt/laboratorium komputerowe	Seminarium
W planie tygodniowym	2	1			
W całym semestrze	30	15			
<p>Treści kształcenia – oddzielnie dla każdej z formy zajęć dydaktycznych</p>	<p><i>Wykład:</i></p> <p>1. Ogólne podstawy spektroskopii, 2h Promieniowanie elektromagnetyczne. Energia cząstek. Kwantowanie energii. Obsadzenie poziomów energetycznych. Widmo. Pasma spektralne i jego parametry. Rodzaje spektroskopii i aparatura do rejestracji widm. Rola metod spektroskopowych w badaniach struktury materii.</p> <p>2. Spektroskopia elektronowa, 4h Energia stanów elektronowych. Diagram Jabłońskiego. Wzbudzenie cząsteczki, reguła Francka-Condon, 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.</p> <p>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</p> <p>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. Równocześnieść 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.</p> <p>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.</p> <p><i>Ćwiczenia:</i></p> <p>1. Promieniowanie elektromagnetyczne – energia, długość fali, liczba falowa. Czas życia układu w stanie wzbudzonym. Wzbudzenie cząsteczki chemicznej – poziomy elektronowe, oscylacyjne i rotacyjne a rodzaje spektroskopii. Energia wzbudzenia a trwałość cząsteczki. 1h</p> <p>2. Spektroskopia elektronowa. Analiza stanów i przejść elektronowych cząsteczki. Przewidywanie położenia pasma w widmie na podstawie struktury cząsteczki. Prawo Lamberta-Beera, wyznaczanie molowego współczynnika absorpcji. Struktura subtelna widma</p>				

elektronowego. Przykłady zastosowań spektroskopii UV-Vis (wyznaczanie stężenia związku, wyznaczenie stałej kwasowości). Wpływ budowy związku oraz czynników zewnętrznych na widmo elektronowe. Widmo emisyjne, przesunięcie Stokesa, wydajność kwantowa emisji fluorescencji i fosforescencji. 2h.

2. Spektroskopia oscylacyjna. Widma układów wieloatomowych, struktura cząsteczki a widmo. Wpływ asocjacji na położenie pasm w widmie IR. Analiza widm IR i Ramana – porównanie i aspekty praktyczne zastosowania tych spektroskopii. 2h.

3. Spektroskopia NMR. Warunek rezonansu, przesunięcie chemiczne, stała sprzężenia. Określanie struktury cząsteczki na podstawie widma ^1H NMR. Przewidywanie widma dla cząsteczki o danej strukturze. Topowość protonów a równocześnieść chemiczna i magnetyczna. Analiza przykładowych widm ^1H , ^{13}C , ^{19}F NMR. 4h.

4. Spektrometria mas. Analiza widm masowych w powiązaniu ze strukturą cząsteczki. 4h.

5. Rozwiązywanie zagadnień strukturalnych w oparciu o dane spektroskopowe i spektrometrii MS. Wnioskowanie o przebiegu reakcji chemicznych, określanie czystości produktów. Badania kinetyki reakcji chemicznej na podstawie danych spektroskopowych. Efekt izotopowy. Wyznaczanie parametrów związanych ze zjawiskami dynamicznymi (temperatura koalescencji). 4h

Lecture:

1. Basics of spectroscopy, 2h
Electromagnetic radiation. Energy of molecules. Quantization of energy. Occupation of energy levels. Electromagnetic spectrum. The spectral band and its parameters. Classification of spectroscopy and spectrometers. The role of spectroscopic methods in structural science.

2. Electronic spectroscopy, 4h
Energy of electronic states. Jablonski diagram. Excitation of a molecule, Franck-Condon principle, excited singlet/triplet state – fluorescence and fosforescencja. The Lambert-Beer law. UV-Vis absorption and fluorescence spectrum. Dependence of a spectrum on a compound structure and solvent. Applications for analysis of electronic properties of materials.

3. Vibrational spectroscopy, IR & Raman, 6h
Energy of vibrational states. Absorption of radiation. Normal vibrations and group frequencies. Raman spectroscopy, scattering of radiation. Polarizability of a molecule and selection rules. Interpretation of vibrational IR & Raman spectra. Characteristic group frequencies in organic compounds. Spectrum-structure relationships. Effect of H-bonding on IR spectrum.

4. NMR spectroscopy, 12h
Basics - spin, angular and nuclear magnetic momentum. Occupation of nuclear spin energy levels. Nuclear magnetic resonance. The action principles of NMR spectrometers, Fourier transformation. Nuclear shielding. NMR chemical shift, scales and standards, structural effects. Chemical and magnetic equivalence of ^1H nuclei. Spin-spin coupling, spin systems. Effect of isotope substitution. Dynamic phenomena, H-bonding effects. Determination of a structure of a chemical compound based on ^1H & ^{13}C NMR spectra as well as prediction of a spectrum based on a structure.

5. Mass spectrometry.
The measurement of mass spectra - physical principles. Ionisation methods. Equipment for mass spectrometry. Mass spectrometry for studying structures of chemical compounds. Characteristic fragmentations of main classes of organic compounds. Determination of atomic composition of a compounds based on a HR-MS spectrum.

Exercises

1. Electromagnetic radiation – energy, wavelength, wavenumber. Excited state lifetime. Molecular excitation –electron, oscillation and rotational levels vs. classification of molecular spectroscopy. Excitation energy vs. stability of a molecule. 1h

2. Electronic spectroscopy. Analysis of electronic states and transitions. Prediction of spectral band location based on a molecular structure. The Lambert-Beer law, calculation of molar extinction coefficient. Oscillation-structure of an electronic band. Examples of applications of UV-Vis spectroscopy (calculation of compound concentration, acidity constant). The effect of molecular structure and external factors on electronic spectra. Emission spectrum, Stokes shift, emission quantum yield. 2h.

3. Vibrational spectroscopy. Spectra of multi-atom systems, molecular structure vs. its spectrum. The effect of H-bond on the IR band location. Analysis of IR & Raman spectra – comparison and practical aspects of the use of IR & Raman spectroscopy. 2h.

4. NMR spectroscopy. Resonance condition, chemical shift, coupling constant. Determination of a structure of a chemical compound based on ^1H & ^{13}C NMR spectra as well as prediction of a spectrum based on a structure. Topicity of protons vs. chemical and magnetic equivalence. Analysis of examples of ^1H , ^{13}C , ^{19}F NMR spectra. 4h.

5. Mass spectrometry. Analysis of mass spectra in relations to molecular structure. 2h.

6. Solving structural problems based on molecular spectroscopy and mass spectrometry data. Assessment of a course of chemical reactions and compound purity. Studies on kinetics of

	chemical reactions based on spectral data. Isotope effect. Determination of parameters relevant for characterization of processes. 4h.
Metody kształcenia	<p><i>Wykład:</i></p> <p>1. Wykład z prezentacją multimedialną.</p> <p><i>Ćwiczenia:</i></p> <p>1. Prezentacja multimedialna. 2. Rozwiązywanie zadań.</p>
Metody sprawdzania efektów uczenia się (dla każdej pozycji efektów uczenia się, w tym, dla umiejętności odwołanie do konkretnych zadań projektowych, laboratoryjnych itp.)	
Nr efektu	Sposób sprawdzania
Zakładane efekty uczenia się w zakresie wiedzy	
W01	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
W02	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności	
U01	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
U02	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
U03	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych	
KS01	Egzamin pisemny, kolokwium pisemne
Metody oceny	<p>Ocena z przedmiotu jest oceną zintegrowaną (ćwiczenia audytoryjne i wykład łącznie). Nie ma oddzielnego zaliczenia i oceny z ćwiczeń. W ramach ćwiczeń (w terminach dodatkowych ogłaszanych na platformie MS Teams z wyprzedzeniem min. 2 tygodni) są 2 kolokwia pisemne (2 × 25 = 50 pkt). Pod koniec semestru jest kolokwium dodatkowe, umożliwiające poprawienie oceny uzyskanej podczas jednego z wcześniejszych zaliczeń. W uzasadnionych przypadkach możliwa jest ustna weryfikacja udzielonych odpowiedzi i zmiana oceny. W przypadku uzyskania niższej punktacji w terminie poprawkowym punktacja końcowa będzie obliczona jako średnia z obu terminów. Po zakończeniu semestru w sesji letniej jest egzamin (50 pkt) i dwa terminy dodatkowe, po jednym w sesji letniej i jesiennej. Warunkiem dopuszczenia do egzaminu jest uzyskanie w trakcie ćwiczeń minimum 17 pkt. (>1/3 maksymalnej punktacji). W uzasadnionych przypadkach możliwa jest ustna weryfikacja udzielonych odpowiedzi i zmiana oceny. W przypadku uzyskania niższej punktacji w terminie późniejszym punktacja końcowa będzie obliczona jako średnia z dwóch ostatnich terminów. Punktacja maksymalna (za kolokwia i egzamin): 100 pkt. Aby zaliczyć przedmiot trzeba uzyskać przynajmniej 50 pkt. Ocena z przedmiotu - na podstawie uzyskanej łącznie liczby punktów: 50 pkt. - dst, 60 - dst 1/2, 70 - db, 80 - db 1/2, 90 - bdb.</p>
Egzamin	Tak
Literatura	<p>1. Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1992</p> <p>2. R. Silverstein, Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007</p> <p>3. A. Rajca, W. Zieliński, Metody spektroskopowe i spektrometria mas w zastosowaniu do identyfikacji związków organicznych. Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, Gliwice, 2018</p>
Witryna www przedmiotu	lulinski.ch.pw.edu.pl
D. Nakład pracy studenta	
Liczba punktów ECTS	4
Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się	120 h, w tym: 1. godziny kontaktowe (obecność na wykładach i ćwiczeniach) 45 h; 2. przygotowanie do kolokwium i egzaminu, obecność na kolokwium i egzaminie 75 h
Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	2 pkt ECTS (45 h, w tym: 1. obecność na wykładach – 30 h, 2. obecność na ćwiczeniach – 15 h)

Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	-
E. Informacje dodatkowe	
Uwagi	O ile nie powoduje to zmian w zakresie powiązań danego przedmiotu z efektami uczenia się określonymi dla programu studiów w treściach kształcenia mogą być wprowadzane na bieżąco zmiany związane z uwzględnieniem najnowszych osiągnięć naukowych.
Data aktualizacji	30.09.2021