

## Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, PG_00063849						
Kierunek studiów	Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna, Inżynieria biomedyczna						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć specjalnościowych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii i Technologii Materiałów Funkcjonalnych						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Ewa Wagner-Wysiecka				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr hab. inż. Ewa Wagner-Wysiecka dr hab. inż. Anna Schmidt				
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	15.0	15.0	0.0	0.0	45
W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0							
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	45		10.0		45.0	100
Cel przedmiotu	Zdobycie umiejętności wykorzystania spektroskopii NMR i IR oraz spektrometrii mas do ustalania struktury związków organicznych						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K7_U12] potrafi w pogłębionym stopniu analizować działanie elementów, układów i systemów związanych z kierunkiem studiów oraz mierzyć ich parametry i badać charakterystyki techniczne, a także planować i przeprowadzać eksperymenty związane z kierunkiem studiów, w tym symulacje komputerowe, interpretować uzyskane wyniki i wyciągać wnioski		Student zna i rozumie zasady działania aparatury wykorzystywanej w badaniach strukturalnych związków organicznych. Potrafi planować eksperymenty oraz interpretować ich wyniki – określić strukturę związku organicznego w oparciu o dane spektroskopowe.		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU1] Ocena realizacji zadania		
	[K7_W10] zna i rozumie w pogłębionym stopniu podstawowe procesy zachodzące w cyklu życia urządzeń, obiektów i systemów technicznych oraz metody wspomagania procesów i funkcji, specyficzne dla kierunku studiów		Student zna i rozumie zasady działania spektroskopowych baz danych i potrafi z nich korzystać		[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym		
	[K7_W53] zna i rozumie w pogłębionym stopniu wybrane aspekty z zakresu diagnostyki biomedycznej		Ma wiedzę z zakresu charakteryzowania i identyfikacji substancji organicznych		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
	[K7_K02] jest gotów do krytycznej oceny odbieranych treści, uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych		Rozumie znaczenie wiedzy w rozwiązywaniu problemów praktycznych		[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce		

Treści przedmiotu	Wyodrębnianie ze złożonych mieszanin poreakcyjnych lub surowców naturalnych i oczyszczanie preparatów w celu otrzymania pożądanego związku organicznego w czystej postaci. Wstęp dotyczący metod spektroskopowych. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądowego - podstawy teoretyczne. Protonowy Rezonans Magnetyczny ( $^1\text{H}$ NMR) podstawy teoretyczne, zakresy przesunięć chemicznych dla poszczególnych klas związków organicznych. Sprężenie spinowe. Obliczanie przesunięć chemicznych dla protonów aromatycznych. Rozwiązywanie zadań. Spektroskopia $^{13}\text{C}$ NMR: podstawy teoretyczne, przesunięcia chemiczne a struktura związku organicznego. Metoda DEPT. Rozwiązywanie zadań z wykorzystaniem m.in. obliczania przesunięć węgla w pierścieniu benzenowym. Spektroskopia korelacyjna 2D NMR. Spektroskopia NMR innych jąder o spinie $\frac{1}{2}$ . Zastosowanie metody NMR w medycynie. Spektroskopia w podczerwieni (IR) wstęp teoretyczny. Charakterystyczne pasma absorpcji dla poszczególnych klas związków organicznych. Techniki wykonywania widm IR. Spektroskopia IR: rozwiązywanie zadań. Spektrometria mas (MS): podstawy teoretyczne. Aparatura. Wstęp do metod jonizacji. Jonizacja elektronami (EI): jon molekularny i jony izotopowe, charakterystyczna fragmentacja poszczególnych klas związków organicznych. Inne metody jonizacji: metoda CI i metoda ESI. Rozwiązywanie zadań.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość chemii organicznej oraz znajomość podstawowych technik laboratoryjnych		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Wykład: pisemne zaliczenie końcowe	51.0%	50.0%
	Laboratorium: zaliczenie kartkówki oraz przygotowanie sprawozdań	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych, PWN, Warszawa 2007.</li> <li>2. W. Zieliński, A. Rajca (red.), Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych, WNT, Warszawa 2000.</li> <li>3. J. McMurry, Chemia organiczna, PWN, Warszawa, 2003.</li> <li>4. E. Białecka-Floriańczyk, J. Włostowska, Ćwiczenia laboratoryjne z chemii organicznej, Wyd. SGGW, Warszawa 2007.</li> <li>5. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Chemia organiczna. WNT, Warszawa 2009.</li> <li>6. P. Suder, J. Silberring (red.), Spektrometria mas, Wyd. UJ, Kraków 2006.</li> </ol> <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dostępne w Internecie bezpłatne bazy danych spektralnych, np. Spectral Database for Organic Compounds SDBS</li> </ol> <p>Adresy eZasobów</p> <p>Adresy na platformie eNauczanie:</p>		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Zastosowanie wybranych metod chromatograficznych do izolacji i identyfikacji związków organicznych. Chromatografia cienkowarstwowa: ogólna charakterystyka, zastosowanie i zasady prawidłowego przygotowania płytek TLC do rozwijania chromatogramu. Chromatografia cienkowarstwowa: metody detekcji. Preparatywna chromatografia cienkowarstwowa. Chromatografia typu <i>flash</i>: czym się charakteryzuje i jakie ma zalety. Spektroskopia NMR: podstawa zjawiska NMR. Jaki spin jądrowy jest najkorzystniejszy z punktu widzenia spektroskopii NMR i jakie jądra mają największe znaczenie praktyczne w spektroskopii NMR? Spektroskopia NMR: etapy wykonywania widma NMR. Wyjaśnić pojęcie przesunięcia chemicznego stosowane w spektroskopii NMR. Stosowana powszechnie skala przesunięcia chemicznego w widmach NMR. <math>^1\text{H}</math> NMR: dlaczego przesunięcia sygnałów protonów aromatycznych są zwykle większe niż alkenów? <math>^1\text{H}</math> NMR: od czego głównie zależą przesunięcia protonów w układach alifatycznych? <math>^1\text{H}</math> NMR: od czego głównie zależą przesunięcia protonów w układach aromatycznych? <math>^1\text{H}</math> NMR: krótko wyjaśnić zjawisko sprzężenia spinowego. Narysować fragment widma dla danego układu protonów, np. CH-CH<sub>2</sub>. Jeśli dany proton ma za sąsiadów dwa nierównocenne chemicznie protony to jaka będzie multipletowość sygnału tego protonu w widmie <math>^1\text{H}</math> NMR? (Zaopatrzyć odpowiedź w odpowiedni rysunek.) Zinterpretować (załączone) widmo <math>^1\text{H}</math> NMR 1-nitropropanu. Proszę narysować fragment widma <math>^1\text{H}</math> NMR zawierający sygnały grupy izopropylowej, która sąsiaduje z atomem tlenu. Proszę obliczyć przesunięcia sygnałów protonów aromatycznych w widmie <math>^1\text{H}</math> NMR np. kwasu salicylowego. Większość widm <math>^1\text{H}</math> NMR rejestrowana jest dla roztworów w CDCl<sub>3</sub>, przy jakich przesunięciach należy spodziewać się w tych widmach sygnałów od niezdeuterowanego rozpuszczalnika i wody w tym rozpuszczalniku? Spektroskopia <math>^{13}\text{C}</math> NMR: dlaczego w typowym widmie <math>^{13}\text{C}</math> NMR obserwujemy jedynie pojedyncze piki? Charakterystyczne obszary w widmie <math>^{13}\text{C}</math> NMR. Zinterpretować widmo <math>^{13}\text{C}</math> NMR prostego, alifatycznego związku organicznego o podanym wzorze strukturalnym. Zinterpretować widmo <math>^{13}\text{C}</math> NMR związku organicznego, zawierającego pierścień benzenowy, o podanym wzorze strukturalnym, obliczyć teoretyczne wartości przesunięć protonów aromatycznych i porównać z rzeczywistymi. Sygnały od rozpuszczalników w widmach <math>^{13}\text{C}</math> NMR, ich przesunięcie chemiczne i multipletowość (omówić na przykładzie wybranych, trzech popularnych rozpuszczalników, np. CDCl<sub>3</sub>, CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub> i CD<sub>3</sub>OD). Omówić ogólnie metodę DEPT <math>^{13}\text{C}</math> NMR. Zinterpretować widma <math>^{13}\text{C}</math> NMR związku o znanej strukturze mając do dyspozycji widmo podstawowe, DEPT 135 i DEPT 90. Omówić zasadnicze różnice między węglowym a protonowym rezonansem magnetycznym. Metody 2D NMR: omówić metodę <math>^1\text{H}</math>-<math>^1\text{H}</math> COSY. Metody 2D NMR: omówić metodę HMQC. Ogólnie omówić zagadnienie: zastosowanie NMR wysokiej rozdzielczości w medycynie. Spektroskopia IR: ogólnie, jakie informacje można uzyskać z widm IR? Ogólnie, od czego zależy częstość drgań rozciągających? Główne zakresy w widmach IR. Metodyka przygotowania próbek na widma IR. Absorpcja w podczerwieni węglowodorów. Charakterystyczne pasma w widmach IR alkoholi (lub: amin, kwasów karboksylowych, estrów, amidów, związków nitrowych lub innych omawianych). Omówić krótko metody specjalne rejestracji widm IR ciała stałego. Spektrometria mas (MS): podstawy teoretyczne spektrometrii mas. Omówić metodę jonizacji elektronami (EI). Sposób przedstawiania widma mas. Profile izotopowe w widmach mas. Wyznaczanie składu atomowego związku chemicznego metodą wysokorozdzielczej spektrometrii mas. Ogólne zasady fragmentacji związków organicznych. Fragmentacja alkanów. Fragmentacja ketonów. Fragmentacja węglowodorów aromatycznych. Zinterpretować widmo MS EI znając wzór strukturalny związku. Przykłady łagodnych metod jonizacji: omówić metodę CI. Metoda jonizacji ESI (ogólnie). Metoda jonizacji ESI: rejestracja widm mas w trybie jonów dodatnich i jonów ujemnych. Zidentyfikować związek chemiczny znając jego wzór sumaryczny oraz dysponując kompletem widm: <math>^1\text{H}</math> NMR, <math>^{13}\text{C}</math> NMR, IR oraz MS.</p>
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.