

Nazwa przedmiotu: Spektroskopia B (1200-1SPEKTBW4)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Spectroscopy B

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Chemii

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Przedmiot ma za zadanie zapoznać studentów z podstawami teoretycznymi najważniejszych metod spektroskopii molekularnej, metodyką rejestracji widm, interpretacją widm pod kątem relacji z symetrią i strukturą związków oraz podstawowymi zastosowaniami analitycznymi spektroskopii molekularnej.

Opis:

Wykład ma za zadanie

- przedstawić systematycznie wiedzę potrzebną do świadomego wykorzystania metod spektroskopowych w chemii,
- zapoznać studenta z podstawami teoretycznymi najważniejszych metod spektroskopii molekularnej,
- zapoznać studenta z metodyką rejestracji widm oraz interpretacją widm.

W części wstępnej przypomniane zostaną właściwości promieniowania elektromagnetycznego oraz podstawowe wiadomości z chemii kwantowej dotyczące kwantowania energii elektronowej, oscylacyjnej i rotacyjnej molekuly. Następnie wyjaśniona zostanie korelacja między strukturą poziomów energetycznych molekuly a postacią widma absorpcyjnego, emisyjnego oraz rozproszenia Ramana oraz związek między stanami kwantowymi molekuly a intensywnością widma. Rozkład Boltzmana. Wprowadzone zostaną najważniejsze pojęcia teorii grup w zastosowaniu do symetrii molekuł. Podczas kolejnych wykładów będą omawiane poszczególne techniki spektroskopowe. Spektroskopia rotacyjna – poziomy energetyczne dwuatomowego rotatora sztywnego; rotacje wieloatomowych molekuł; widmo mikrofalowe i rotacyjny efekt Ramana. Spektroskopia oscylacyjna - oscylator harmoniczny i anharmoniczny; poziomy energetyczne i funkcje falowe dwuatomowego oscylatora harmonicznego, pojęcie drgania normalnego; widmo podczerwieni i oscylacyjny efekt Ramana; rezonansowy efekt Ramana, zastosowanie teorii grup w interpretacji widm oscylacyjnych, rezonans Fermiego, widma oscylacyjno-rotacyjne - reguły wyboru; transformacja Fouriera. Widma elektronowe, reguły wyboru w atomach i cząsteczkach, zastosowanie teorii grup w interpretacji widm elektronowych; struktura oscylacyjna i rotacyjna widm elektronowych; wyznaczanie energii dysocjacji z widm elektronowych; widma luminescencji. Dichroizm kołowy. Spektroskopia fotoelektronów - podstawy spektroskopii XPS, UPS i Augera. Elektronowy rezonans paramagnetyczny (EPR) - kwantowanie energii elektronu w zewnętrznym polu magnetycznym; współczynnik rozszczepienia spektroskopowego g; struktura nadsubtelna widm EPR. Jądrowy rezonans magnetyczny (NMR) - stany energetyczne magnetycznych jąder w zewnętrznym polu magnetycznym; warunek rezonansu; zjawisko ekranowania jąder; sprzężenia spinowo-spinowe; równocześnieść chemiczna i magnetyczna; rezonans 1H, 13C, 14N, 15N i 19F; procesy relaksacji w NMR; efekt Overhausera; wielowymiarowe widma NMR. Tomografia NMR.

Pokazane zostaną możliwości zastosowania metod spektroskopowych w rozwiązywaniu różnych problemów w chemii (identyfikacja związków organicznych, określanie budowy związków chemicznych, zastosowania analityczne).

Literatura:

P. W. Atkins, Chemia Fizyczna, PWN, Warszawa, 2003.

Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN, Warszawa, 1992.

Skrypt dostępny u prowadzącego

Efekty kształcenia:

Po ukończeniu wykładu student powinien umieć:

- dokonać wyboru technik spektroskopowych do rozwiązywania określonego problemu
- wyjaśnić zasady pomiaru lub rejestracji widm w wybranych obszarach spektralnych
- przeprowadzić interpretację widm pod kątem relacji z budową związków chemicznych
- posługiwać się wynikami obliczeń w interpretacji widm
- rozumieć i krytycznie odnosić się do ograniczeń poszczególnych technik spektroskopowych.

Metody i kryteria oceniania:

Egzamin końcowy przeprowadzany w formie egzaminu pisemnego z pytaniami otwartymi. Czas pisania 90 minut.

Praktyki zawodowe:

N/A

Kierunek podstawowy MISMaP

chemia

Rodzaj przedmiotu

obowiązkowe

Tryb prowadzenia

w sali

Założenia (opisowo)

Zakłada się, że studenci mają podstawową wiedzę z dziedziny fizyki (mechanika, klasyczny elektromagnetyzm) oraz chemii kwantowej. Znają w zarysach rozwiązania równania Schroedingera dla rotatora sztywnego, oscylatora harmonicznego i atomu wodoru.

Założenia (lista przedmiotów)

Chemia kwantowa B (1200-1CHKWB3)

Chemia kwantowa A (1200-1CHKWAW3)

Fizyka A (1200-1FIZA2)

Fizyka B (1200-1FIZB2)

Punkty przedmiotu w cyklach:

| <bez przypisanego programu> | | | |
|---|--------|------------|-----------|
| Typ punktów | Liczba | Cykl pocz. | Cykl kon. |
| Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS) | 5,5 | 2013L | |