

Formularz opisu przedmiotu (formularz sylabusu) w Warsaw-4-PhD**A) Ogólny opis przedmiotu**

Nazwa przedmiotu	Zaawansowane metody identyfikacji związków organicznych
Imię i nazwisko osoby prowadzącej przedmiot	Prof. dr hab. Witold Danikiewicz
Jednostka	Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk
Punkty ECTS	2 ECTS
Forma/typ zajęć	Wykład, 15 godz./semestr Samodzielne rozwiązywanie zadań prezentowanych podczas wykładu oraz znajdujących się na stronie internetowej Studiów Doktoranckich IChO PAN (http://www.icho.edu.pl/materialy-witold-danikiewicz.php).
Język wykładowy	polski
Skrócony opis przedmiotu	W ramach wykładu zostaną zaprezentowane nowoczesne metody spektroskopowe i obliczeniowe, służące do potwierdzania budowy cząsteczek związków znanych i ustalania budowy nieznanymi związków organicznych. Szczególny nacisk będzie położony na właściwy wybór metod do rozwiązania konkretnych problemów i maksymalne wykorzystanie informacji, których te metody dostarczają.
Pełny opis przedmiotu	Celem wykładu jest zaprezentowanie nowoczesnych metod spektroskopowych i obliczeniowych, służących do potwierdzania budowy cząsteczek związków znanych i ustalania budowy nieznanymi związków organicznych. W ramach wykładu zostaną omówione następujące zagadnienia: <ul style="list-style-type: none">• Wprowadzenie: współczesny arsenał metod służących do ustalania budowy cząsteczek związków organicznych.• Spektroskopia w podczerwieni.• Spektrometria mas.• Spektrometria magnetycznego rezonansu jądrowego.• Spektrometria dichroizmu kołowego.• Programy do obróbki i analizy widm oraz programy do modelowania molekularnego.• Wykorzystanie komputerowych baz danych spektralnych.• Ogólna metodyka postępowania podczas ustalania budowy cząsteczek związków organicznych.• Kompleksowe wykorzystanie metod spektralnych do ustalania budowy cząsteczek:<ul style="list-style-type: none">○ proste przykłady związków alifatycznych i aromatycznych;○ związki średnio złożone: terpeny i inne układy alicykliczne;○ związki zawierające fluor i fosfor;○ wybrane klasy związków o dużym znaczeniu: cukry, aminokwasy, beta-laktamy, terpeny;○ analiza widm przykładowych związków bardzo złożonych.
Wymagania wstępne	Zaliczony podstawowy kurs chemii organicznej z elementami metod spektroskopowych lub oddzielny wykład z podstaw technik spektroskopowych w chemii ze szczególnym uwzględnieniem magnetycznego rezonansu jądrowego.
Efekty uczenia się	W zakresie wiedzy: <ol style="list-style-type: none">1. Dysponuje wiedzą z zakresu podstaw fizycznych najważniejszych metod spektroskopowych stosowanych do ustalania budowy związków organicznych: magnetycznego rezonansu jądrowego, spektrometrii mas, spektroskopii w podczerwieni, rentgenowskiej analizy strukturalnej i dichroizmu kołowego.2. Potrafi wskazać jakie informacje o budowie cząsteczek związków organicznych można uzyskać z poszczególnych metod spektroskopowych, w

	<p>szczegółności potrafi powiązać elementy budowy cząsteczki z odpowiednimi cechami widm.</p> <p>W zakresie umiejętności:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Posiada umiejętność właściwego wyboru metod spektroskopowych do rozwiązania konkretnego problemu analitycznego. 2. Potrafi interpretować wyniki wykonanych pomiarów spektroskopowych i wykorzystać je do ustalenia bądź potwierdzenia budowy cząsteczki badanego związku. 3. Potrafi wykorzystać proste metody obliczeniowe chemii kwantowej do wsparcia procesu ustalania budowy cząsteczki badanego związku. 4. Potrafi korzystać z literatury z obszaru metod spektralnych stosowanych w chemii organicznej, w tym z baz danych i czasopism naukowych w sposób wystarczający do planowania pomiarów spektroskopowych i interpretacji ich wyników. <p>W zakresie kompetencji:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Potrafi uzasadnić potrzebę dokończenia się w oparciu o najnowszą literaturę z obszaru metod spektralnych stosowanych w chemii organicznej.
Metody i kryteria oceniania	<p>W zakresie wiedzy: dyskusja ze studentami, egzamin pisemny</p> <p>W zakresie umiejętności: dyskusja ze studentami, egzamin pisemny</p> <p>W zakresie kompetencji: dyskusja ze studentami, egzamin pisemny</p>
Sposób zaliczenia	Egzamin pisemny; zalicza 60% maksymalnej liczby punktów. W przypadku egzaminu poprawkowego dopuszcza się formę ustną.
Literatura	<p>Po polsku:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle „Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych” PWN 2007. 2. W. Zieliński, A. Rajca (red.) „Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych” WNT 1995. 3. E. de Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant „Spektrometria mas” WNT 1998. 4. R.A.W. Johnstone, M.E. Rose „Spektrometria mas” PWN 2001. <p>Po angielsku:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman „Organic Structures from Spectra” Wiley wyd. 4 2008 r., wyd. 5 2013 r. – szczególnie polecane. 2. T.N. Mitchell, B. Costisella „NMR – From Spectra to Structures” Springer 2007. 3. Y-C. Ning „Structural Identification of Organic Compounds with Spectroscopic Techniques” Wiley-VCH 2005. 4. E. Breitmaier „Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry” Wiley 2007, wyd. 3. 5. U. Weber, H. Thiele „NMR Spectroscopy: Modern Spectral Analysis” Wiley-VCH 1998. <p>Ponadto słuchacze powinni korzystać z materiałów zamieszczonych stronie internetowej Studiów Doktoranckich IChO PAN (http://www.icho.edu.pl/materiały-witold-danikiewicz.php)</p>