

Szczegółowy opis zajęć (KARTA PRZEDMIOTU)

Nazwa zajęć: Zastosowania metod spektroskopowych w analizie substancji biologicznie aktywnych

Kod zajęć:

Przynależność do grupy zajęć:

Rodzaj zajęć: kierunkowy
obowiązkowy

Kierunek studiów: Chemia

Poziom studiów: studia drugiego stopnia

Profil studiów: ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Specjalność (specjalizacja): wszystkie specjalności

Rok studiów: 1

Semestr studiów: 1

Formy prowadzenia zajęć, wraz z liczbą godzin dydaktycznych:

wykłady – 15;
laboratorium – 75.

Język/i, w którym/ch prowadzone są zajęcia:

Liczba punktów ECTS (zgodnie z programem studiów): 6

* – pozostawić właściwe

1. Założenia przedmiotu:

Zapoznanie i poszerzenie wiadomości dotyczących wykorzystania rentgenografii strukturalnej oraz metod spektroskopowych takich jak: NMR wysokiej rozdzielczości, korelacyjnego NMR (2D NMR), MS, IR-Raman, EPR do identyfikacji bądź potwierdzenia struktury złożonych cząsteczek z grupy związków biologicznie aktywnych oraz polimerów.

2. Odniesienie kierunkowych efektów uczenia się do form prowadzenia zajęć oraz sposobów weryfikacji i oceny efektów uczenia się osiągniętych przez studenta:

symbol	zakładane efekty uczenia się student, który zaliczył zajęcia:	formy prowadzenia zajęć	sposoby weryfikacji i oceny efektu uczenia się
Wiedza: zna i rozumie			
K2A_W05	ma rozszerzoną wiedzę na temat spektroskopowego określania struktury związków chemicznych oraz metod stosowanych w analizie i symulacji widm jądrowego rezonansu magnetycznego	wykład, laboratorium	kolokwium
K2A_W10	zna zasady działania aparatury naukowej stosowanej w metodach spektroskopowych	wykład, laboratorium	kolokwium
Umiejętności: potrafi			
K2A_U04	potrafi zastosować zaawansowane narzędzia spektroskopowe do identyfikacji grup funkcyjnych oraz struktury związku chemicznego	wykład, laboratorium	kolokwium
K2A_U05	potrafi korzystać z profesjonalnego oprogramowania w analizie wyników, projektowaniu i przeprowadzaniu symulacji związanych z problemami chemicznymi	laboratorium	kolokwium
Kompetencje społeczne: jest gotów do			
K2A_K02	ma świadomość odpowiedzialności za wspólnie realizowane zadania, związane z pracą zespołową	wykład, laboratorium	kolokwium

3. Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się (zgodnie z programem studiów):

Diamagnetyki i paramagnetyki. Orbitalny i spinowy magnetyczny moment dipolowy elektronu. Spinowy magnetyczny moment dipolowy jądra. Zachowanie elektronu i jądra w polu magnetycznym (EPR, NMR), obsadzenie poziomów energetycznych. Podobieństwa i różnice między EPR i NMR. Wielkości identyfikujące analizowaną substancję w EPR. Wielkości identyfikujące analizowaną substancję w NMR. Widma NMR produktów reakcji rodnikowych (CIDNP), równanie Kapteina. Widma NMR wysokiej rozdzielczości: widma I rzędu i wyższych rzędów, wpływ stopnia obsadzenia poziomów energetycznych i znaku J na wygląd widma, układy spinowe typu AB, AB₂, ABX, AA'XX' i możliwości ich analizy. Wpływ zjawisk dynamicznych na widma NMR i wykorzystanie NMR do badań takich zjawisk. Metody impulsowe w NMR, określenie czasu relaksacji metodą echa spinowego, krótkie omówienie wybranych sekwencji impulsowych, DEPT. Widma korelacyjne (2D), omówienie sekwencji impulsowej stosowanej w HETCOR. Wykorzystanie widm korelacyjnych HMBC, COSY, INADEQUATE, TOCSY, NOESY do określenia budowy związku. NMR polimerów. Obraz widmowy jednostek powtarzalnych makrocząsteczki i grup końcowych. Źródła poszerzenia linii rezonansowych polimerów. Analiza regionieregularności polimerów zawierających fluor. Izomeria cis – trans polidienów. Sekwencje konfiguracyjne w makrocząsteczkach z węglami pseudochiralnymi w łańcuchu i ich obraz w widmach NMR. Sekwencje kompozycyjne w widmach NMR kopolimerów. Sekwencje konfiguracyjno-kompozycyjne. Strukturalna analiza rentgenowska monokryształów. Ciała krystaliczne: budowa, wskaźniki Millera, układy krystalograficzne. Promieniowanie X, historia, cechy, tworzenie. Dyfrakcja promieni X na monokryształach, Teoria Braggów i Lauego. Sieć odwrotna. Analiza refleksów. Mapy gęstości elektronowych. Metody otrzymywania

monokryształów.

4. Opis sposobu wyznaczania punktów ECTS:

Forma aktywności	Liczba godzin / punktów ECTS
Liczba godzin zajęć, niezależnie od formy ich prowadzenia	90/3
Praca własna studenta - przygotowanie do zajęć	30/1
Praca własna studenta - przygotowanie do kolokwium	30/1
Inne - konsultacje	30/1
Suma godzin	180
Liczba punktów ECTS przypisana do zajęć	6

Objaśnienia:

* – praca własna studenta, należy wymienić formy aktywności, np. *przygotowanie do zajęć, interpretacja wyników, opracowanie raportu z zajęć, przygotowanie do egzaminu, zapoznanie się z literaturą, przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania itp.*

** – inne np. *dotatkowe godziny zajęć*

5. Wskaźniki sumaryczne:

- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczycieli akademickich lub innych osób prowadzących zajęcia i studentów: 90/3
- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach związanych z prowadzoną w Politechnice Śląskiej działalnością naukową w dyscyplinie lub dyscyplinach, do których przyporządkowany jest kierunek studiów – w przypadku studiów o profilu ogólnoakademickim: 180/6
- liczba godzin zajęć oraz liczba punktów ECTS na zajęciach kształtujących umiejętności praktyczne – w przypadku studiów o profilu praktycznym: 0
- liczba godzin zajęć prowadzonych przez nauczycieli akademickich zatrudnionych w Politechnice Śląskiej jako podstawowym miejscu pracy: 90

6. Osoby prowadzące poszczególne formy zajęć (imię, nazwisko, stopień naukowy lub stopień w zakresie sztuki, tytuł profesora, służbowy adres e-mail):

dr hab. inż. Sławomir Boncel, prof. Pol. Śl., slawomir.boncel@polsl.pl

dr hab. inż. Nikodem Kuźnik, prof. Pol. Śl., nikodem.kuznik@polsl.pl

dr inż. Tadeusz Bieg, tadeusz.bieg@adres.pl

dr inż. Wojciech Domagała, wojciech.domagala@polsl.pl

dr inż. Mirosława Grymel, mirosława.grymel@polsl.pl

dr inż. Rafał Jędrysiak, rafal.jedrysiak@polsl.pl

dr inż. Anna Korytkowska-Wałach, anna.korytkowska-walach@polsl.pl

dr inż. Agnieszka Stolarczyk, agnieszka.stolarczyk@polsl.pl

7. Szczegółowy opis form prowadzenia zajęć:

1) wykłady:

- szczegółowe treści programowe:

Analiza ^1H NMR jakościową i ilościową. Standardy przesunięcia chemicznego i ilościowe. Widma wyższego rzędu, sprzężenia wirtualne, sprzężenia heterojądrowe, widma wielowymiarowe. Interpretacja widm ^1H i ^{13}C NMR, w tym mieszanin produktów, widm wyższego rzędu oraz widm dwuwymiarowych. Strukturalna analiza rentgenowska - historia odkrycia promieniowania rentgenowskiego, cechy promieniowania rentg. oraz jego dyfrakcja na kryształach. Elementy symetrii, płaszczyzny Millera, upakowanie atomów w kryształach.

- stosowane metody kształcenia, w tym metody i techniki kształcenia na odległość:

Wykład prowadzony jest w formie interaktywnej prezentacji.

- forma i kryteria zaliczenia, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu:

Materiał z wykładu zaliczany jest w formie pisemnego kolokwium. Są 3 terminy kolokwium.

- organizacja zajęć oraz zasady udziału w zajęciach, ze wskazaniem czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa,

Wykłady prowadzone są wg harmonogramu opublikowanego na pierwszym wykładzie oraz na Platformie Edukacji Zdalnej. Zgodnie z Regulaminem studiów wykłady są otwarte i nieobowiązkowe.

2) laboratorium:

- szczegółowe treści programowe:
Analiza ^1H NMR jakościową i ilościową. Interpretacja widm ^1H i ^{13}C NMR, w tym mieszanin produktów, widm wyższego rzędu oraz widm dwuwymiarowych. Spektrometria mas (MS): przygotowanie próbki, omówienie analizy interpretacja widm fragmentacyjnych. Interpretacja widm Ramana, EPR i zaawansowanych widm IR. Strukturalna analiza rentgenowska - analiza oddziaływań międzycząsteczkowych, pseudosymetrii, aromatyczności oraz stereochemii w strukturach krystalicznych dostępnych poprzez bazę CCDC.
 - stosowane metody kształcenia, w tym metody i techniki kształcenia na odległość:
Laboratorium praktyczne - zapoznanie się z techniką przez wizytę w pracowni, przygotowanie próbek do analizy, wykonanie pomiarów i analiza otrzymanych wyników.
 - forma i kryteria zaliczenia, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu:
Zaliczenie odbywa się na podstawie cząstkowych zaliczeń z 10 zajęć laboratoryjnych i kolokwium z materiału przedstawionego na wykładzie. Do zaliczenia przedmiotu wymagana są pozytywne oceny z wszystkich zajęć laboratoryjnych i z kolokwium. Są trzy terminy zaliczenia zajęć laboratoryjnych i kolokwium.
 - organizacja zajęć oraz zasady udziału w zajęciach, ze wskazaniem czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa,
Zajęcia laboratoryjne prowadzone są wg harmonogramu opublikowanego na pierwszym wykładzie oraz na Platformie Edukacji Zdalnej. Zgodnie z Regulaminem studiów zajęcia laboratoryjne są obowiązkowe.
8. Opis sposobu ustalania oceny końcowej (zasady i kryteria przyznawania oceny, a także sposób obliczania oceny w przypadku zajęć, w skład których wchodzi więcej niż jedna forma prowadzenia zajęć, z uwzględnieniem wszystkich form prowadzenia zajęć oraz wszystkich terminów egzaminów i zaliczeń, w tym także poprawkowych):
Na zajęciach laboratoryjnych student może uzyskać 2 punkty z krótkiego sprawdzianu na początku zajęć oraz 3 punkty z zadania kontrolnego na końcu zajęć. Do zaliczenia zajęć laboratoryjnych potrzeba zdobyć min. 2,5 pkt. Następnie obliczana jest średnia arytmetyczna z 10 zaliczeń laboratoryjnych i stanowi ona 65% oceny końcowej. 35% oceny końcowej to ocena z kolokwium dot. materiału z wykładów.
9. Sposób i tryb uzupełniania zaległości powstałych wskutek:
- nieobecności studenta na zajęciach
Wykłady są nieobowiązkowe, więc student uzupełnia wiedzę na podstawie literatury. Zajęcia laboratoryjne są obowiązkowe, więc w razie nieobecności student kontaktuje się z prowadzącym w terminie konsultacji, gdzie uzgadnia sposób indywidualnego uzupełnienia zaległych zajęć.
 - różnic w programach studiów osób przenoszących się z innego kierunku studiów, z innej uczelni albo wznawiających studia na Politechnice Śląskiej,
Student powinien spełnić wymagania wstępne i dodatkowe, aby mógł przystąpić do zajęć.
10. Wymagania wstępne i dodatkowe, z uwzględnieniem sekwencyjności zajęć:
Wymagana jest znajomość teoretyczna technik ^1H i ^{13}C NMR oraz MS. Wymagana jest podstawowa umiejętność interpretowania widm w tych technikach. Warunkiem koniecznym jest także znajomość podstawowego kursu chemii fizycznej, organicznej i nieorganicznej na poziomie studiów I stopnia.
11. Zalecana literatura oraz pomoce naukowe:
1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, *Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych*, PWN, Warszawa 2007. (NMR, DN, IR, MS)
 2. Praca zbiorowa pod redakcją W. Zielińskiego i A. Rajcy, *Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych*, WNT, Warszawa 2000. (NMR, DN, IR, MS, XR)
 3. H. Günther, *Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego*, PWN, Warszawa 1983. (NMR)
 4. W. Przygocki, *Metody fizyczne badań polimerów*, PWN, Warszawa 1990. (NMR-2)
 5. Praca zbiorowa pod redakcją Z. Floriańczyka i S. Penczka, *Chemia polimerów*, t. 1, *Makrocząsteczki i metody ich otrzymywania*, rozdz. 2, *Mikrostruktura polimeru*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2001. (NMR-2)
 6. J. Stankowski, W. Hilezer, *Wstęp do spektroskopii rezonansów magnetycznych*, PWN, Warszawa 2005. (EPR)
 7. P. W. Atkins, *Chemia fizyczna*, PWN, Warszawa 2007. (EPR)
 8. R. Kirmse, J. Stach, *Spektroskopia EPR. Zastosowania w chemii*, PWN, Warszawa 1992. (EPR)
 9. R. A. W. Johnstone, M. E. Rose, *Spektrometria mas*, PWN, Warszawa 2001. (MS)
 10. E. de Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant, *Spektrometria mas*, WNT, Warszawa 1998. (MS)
 11. Z. Kęcki, *Podstawy spektroskopii molekularnej*, PWN, Warszawa 1988. (IRR)
 12. J. Sadlej, *Spektroskopia molekularna*, 2002, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1998. (IRR)
 13. H. Barańska, A. Łabudzińska, J. Terpiński, *Laserowa Spektrometria Ramanowska*, PWN, Warszawa 1981. (IRR)
 14. Z. Kosturkiewicz, *Metody krystalografii*, Wydawnictwo Naukowe AMU, Poznań 2000. (XR)
 15. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, *Krystalografia*, PWN, Warszawa 2008. (XR)
 16. Z. Trzaska Durski, H. Trzaska Durska, *Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej*, PWN, Warszawa 1994. (XR)
12. Opis kompetencji prowadzących zajęcia (np. publikacje, doświadczenie zawodowe, certyfikaty, szkolenia itp. związane z

treściami programowymi realizowanymi w ramach zajęć):

Prowadzący są specjalistami w zakresie technik spektroskopowych, które omawiają. Ich kompetencje poświadczone są dyplomami ukończenia studiów, stopniami doktora nauk chemicznych, które wynikają z pracy badawczej realizowanej z wykorzystaniem technik spektroskopowych. Dodatkowym potwierdzeniem kompetencji są liczne, recenzowane publikacje naukowe prowadzący zawierające badania z zastosowaniem technik spektroskopowych.

13. Inne informacje:

brak