

**Karta przedmiotu oferowanego w Szkole Doktorskiej nr 1
– semestr letni 2021/2022**

TYTUŁ
Zastosowanie spektroskopii NMR do identyfikacji struktury związków organicznych
JEDNOSTKA PROWADZĄCA
Szkoła doktorska nr 1
DYSCYPLINA NAUKOWA
Nauki chemiczne
JEDNOSTKA REALIZUJĄCA
102000 - Wydział Chemiczny
OPIS SKRÓCONY PRZEDMIOTU
Celem zajęć jest zdobycie podstawowych umiejętności pozwalających praktycznie wykorzystać dostępne techniki 1D i 2D NMR do określenia struktury związków organicznych, małocząsteczkowych i wielkocząsteczkowych z uwzględnieniem kompleksów metali.
OPIS PRZEDMIOTU
<p>Celem zajęć jest zapoznanie doktorantów z spektroskopią NMR jako podstawowym narzędziem stosowanym do identyfikacji struktury małocząsteczkowych i wielkocząsteczkowych (polimerowych) związków organicznych. W ramach prowadzonych zajęć oprócz omówienia podstaw spektroskopii NMR skupimy się przede wszystkim na praktycznym wykorzystaniu dostępnych technik do rozwiązania najczęściej spotykanych problemów związanych z identyfikacją struktury otrzymanych produktów.</p> <p>Na rozwiązanie tego typu problemów składają się trzy etapy postępowania. Po pierwsze, wybór strategii związany z zastosowaniem dostępnych technik NMR i oceny ich skuteczności uwzględniający przygotowanie próbki do badań. Po drugie, etap związany z przeprowadzeniem eksperymentu do którego należy wybór parametrów rejestracji określonych widm NMR. Po trzecie etap związany z interpretacją uzyskanych wyników. W tej części zostaną omówione; najczęściej stosowane programy służące do edycji widm, stosowane strategie analizy widm jednowymiarowych i dwuwymiarowych z uwzględnieniem metod opartych na symulacji widm oraz zostaną przedstawione sposoby zapisu danych NMR stosowane w publikacjach naukowych.</p>

Na zajęciach zostaną omówione klasyczne techniki jednowymiarowe, ^1H , ^{13}C , ^{19}F i ^{31}P NMR oraz dwuwymiarowe ^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H NOESY, ^1H - ^{13}C HMQC, ^1H - ^{13}C HMBC NMR. Bazując na ograniczonej liczbie dostępnych technik NMR skupimy się na możliwości ich wykorzystania do rozwiązania typowych problemów związanych z określeniem struktury związków organicznych. Ponadto w tym zakresie zostaną przedstawione możliwości wykorzystania danych literaturowych w postaci opracowań książkowych, atlasów widm i publikacji naukowych.

W ramach prowadzonych zajęć, 10 godzin zostanie poświęconych omówieniu podstawowych technik NMR i przykładowych widm. Natomiast 20 godzin zostanie poświęcone rozwiązaniu typowych problemów np. zaplanowaniu odpowiednich eksperymentów lub analizie zarejestrowanych widm. Zaliczenie przedmiotu będzie polegało na rozwiązaniu konkretnego problemu np. interpretacji widm NMR potwierdzającego lub wykluczającego przebieg określonej reakcji.

LITERATURA

1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, Spektroskopowe Metody Identyfikacji Związków organicznych, PWN
2. E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, Structure Determination of Organic Compounds, Springer

EFEKTY UCZENIA

Po ukończeniu zajęć student:

- a) zna podstawy teoretyczne technik 1D (^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P) i 2D (^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H NOESY, ^1H - ^{13}C HMQC, ^1H - ^{13}C HMBC, i inne) NMR,
- b) potrafi samodzielnie wybrać technikę NMR oraz zaplanować eksperyment pozwalający na identyfikację dowolnego związku organicznego otrzymanego w laboratorium,
- c) potrafi samodzielnie przeprowadzić interpretację widm 1D i 2D NMR prowadzącą do określenia struktury związku organicznego.

JĘZYK WYKŁADOWY PRZEDMIOTU		PUNKTY ECTS
polski		2
FORMA PROWADZONYCH ZAJĘĆ	WYMIAR GODZIN	PROWADZĄCY
Wykład (WYK)	30	Piotr Bujak, dr hab. inż.