

**KARTA PRZEDMIOTU OFEROWANEGO W SZKOLE DOKTORSKIEJ**

Kod przedmiotu	4606-PS-00000EK-0138	Nazwa przedmiotu	w j. polskim	Zastosowanie spektroskopii NMR do identyfikacji struktury związków organicznych		
			w j. angielskim	Organic structure determination using NMR spectroscopy		
Przynależność do grupy przedmiotów	przedmioty specjalnościowe					
Koordinator przedmiotu	dr hab. inż. Piotr Bujak, profesor uczelni					
Jednostka realizująca	Wydział Cheminy	Dyscyplina/y naukowa*	nauki chemiczne, inżynieria chemiczna			
Poziom kształcenia	Kształcenie doktorantów	Semestr	letni			
Język zajęć	polski					
Forma zaliczenia:	zaliczenie na ocenę	Sumaryczna liczba godzin w semestrze	30	Sumaryczna liczba ECTS	2	
Minimalna liczba uczestników	12	Maksymalna liczba uczestników	50	Dostępność dla studentów	Tak	
Typ zajęć		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia projektowe	Laboratorium	Seminarium
Liczba godzin zajęć	tygodniowo	3				
	łącznie w semestrze	30				

\* nie dotyczy warsztatu badacza

**1. Wymagania wstępne**

Znajomość podstawowych zagadnień związanych z chemią organiczną i stereochemią.

**2. Cele przedmiotu**

Celem zajęć jest zdobycie podstawowych umiejętności pozwalających praktycznie wykorzystać dostępne techniki 1D i 2D NMR do określenia struktury związków organicznych, małocząsteczkowych i wielocząsteczkowych z uwzględnieniem kompleksów metali

**3. Treści programowe (dla każdego typu zajęć oddzielnie)**

**Wykład**

Celem zajęć jest zapoznanie doktorantów z spektroskopią NMR jako podstawowym narzędziem stosowanym do identyfikacji struktury małocząsteczkowych i wielocząsteczkowych (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. 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.

Na zajęciach zostaną omówione klasyczne techniki jednowymiarowe,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$  i  $^{31}\text{P}$  NMR oraz dwuwymiarowe  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOESY,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMQC,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  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 samodzielnej pracy polegającej na rozwiązywaniu typowych problemów np. zaplanowaniu odpowiednich eksperymentów lub analizie zarejestrowanych widm.

Laboratorium

-

4. Efekty uczenia się

Rodzaj efektu	Opis efektu uczenia się	Odniesienie do efektów uczenia się w SD PW	Sposób weryfikacji efektów uczenia*
<b>Wiedza</b>			
W01	Doktorant zna podstawy teoretyczne metod spektroskopowych oraz rozwiązania techniczne (budowa spektrometrów NMR) pozwalające na analizę strukturalną związków organicznych.	SD_W2	kolokwium pisemne
<b>Umiejętności</b>			
U01	Doktorant potrafi zaplanować serię eksperymentów (dobrac techniki NMR) pozwalające na analizę strukturalną związku organicznego.	SD_U1	kolokwium pisemne
U02	Doktorant potrafi dokonać interpretacji widm <sup>1</sup> H i <sup>13</sup> C NMR oraz przygotować na tej podstawie opis widm do publikacji.	SD_U1	kolokwium pisemne
U03	Doktorant potrafi dokonać interpretacji widm <sup>1</sup> H i <sup>13</sup> C NMR oraz dobrać techniki 2D NMR pozwalające na jednoznaczny identyfikację struktury i przypisanie wszystkich sygnałów.	SD_U1	kolokwium pisemne
<b>Kompetencje społeczne</b>			
K01	Doktorant uznaje znaczenie metod spektroskopowych w rozwiązywaniu problemów badawczych związanych z identyfikacją związków organicznych	SD_K2	kolokwium pisemne

\* dozwolone sposoby weryfikacji efektów uczenia się: egzamin; egzamin ustny; kolokwium pisemne; kolokwium ustne; ocena projektu; ocena sprawozdania; ocena raportu; ocena prezentacji; ocena aktywności w trakcie zajęć; prace domowe; test

5. Kryteria oceny

Na ocenę bdb (5,0) Doktorant potrafi dobrać techniki NMR pozwalające na identyfikację struktury związku organicznego, potrafi dokonać prawidłowej pełnej interpretacji widm <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR przy wykorzystaniu technik dwuwymiarowych, potrafi posługiwać się oprogramowaniem związanym z edycją widm, potrafi przygotować opis NMR do publikacji naukowej. Na ocenę dst (3,0) Doktorant zna podstawy spektroskopii NMR, potrafi dokonać interpretacji widm <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR polegającą na ustaleniu głównych elementów struktury charakterystycznych dla danej grupy związków organicznych.

6. Literatura

Literatura podstawowa:

R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, Spektroskopowe Metody Identyfikacji Związków organicznych, PWN

Literatura uzupełniająca:

E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, Structure Determination of Organic Compounds, Springer

7. Nakład pracy doktoranta niezbędny do osiągnięcia efektów uczenia się\*\*

Lp.	Opis	Liczba godzin
1	godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim wynikające z planu	27
2	Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim w ramach konsultacji, egzaminów, sprawdzianów itp.	3
3	Godziny pracy samodzielnej doktoranta w ramach przygotowania do zajęć oraz opracowania sprawozdań, projektów, prezentacji, raportów, prac domowych	0
4	godziny pracy samodzielnej doktoranta w ramach przygotowania do egzaminu, sprawdzianu, zaliczenia	30
<b>Sumaryczny nakład pracy doktoranta</b>		<b>60</b>
<b>Liczba punktów ECTS</b>		<b>2</b>

\*\* 1 ECTS pracy = 25-30 godzin nakładu pracy doktoranta (np. 2 ECTS = 60 godzin; 4 ECTS = 110 godzin)