

KARTA PRZEDMIOTU OFEROWANEGO W SZKOLE DOKTORSKIEJ

Kod przedmiotu	4606-PS-000EKP-0292	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	przedmiot specjalnościowy					
Koordinator przedmiotu	dr hab. inż. Piotr Bujak, profesor uczelni					
Jednostka realizująca	Wydział Cheminy	Dyscyplina/y naukowa*	nauki chemiczne, inżynieria chemiczna, biotechnologia			
Poziom kształcenia	Kształcenie doktorantów	Semestr	Lecni/Zimowy			
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 rozwiązywania 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, ^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 rozwiązywania 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 rozwiązaniu 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*
Wiedza			
W01	Doktorant zna podstawy teoretyczne metod spektroskopowych oraz rozwiązania techniczne (budowa spektrometrów NMR) pozwalające na analizę strukturalną związków organicznych.	SD_W2	kolokwium pisemne
Umiejętności			
U01	Doktorant potrafi zaplanować serię eksperymentów (dobór techniki NMR) pozwalające na analizę strukturalną związku organicznego.	SD_U1	kolokwium pisemne
U02	Doktorant potrafi dokonać interpretacji widm ¹ H i ¹³ C NMR oraz przygotować na tej podstawie opis widm do publikacji.	SD_U1	kolokwium pisemne
U03	Doktorant potrafi dokonać interpretacji widm ¹ H i ¹³ C NMR oraz dobrać techniki 2D NMR pozwalające na jednoznaczny identyfikację struktury i przypisanie wszystkich sygnałów.	SD_U1	kolokwium pisemne
Kompetencje społeczne			
K01	Doktorant uznaje znaczenie metod spektroskopowych w rozwiązywaniu problemów badawczych związanych 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 ¹H i ¹³C 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 ¹H i ¹³C 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
Sumaryczny nakład pracy doktoranta		60
Liczba punktów ECTS		2

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