

SYLABUS

DOTYCZY CYKLU KSZTAŁCENIA 2023/24-2026/27

(skrajne daty)

Rok akademicki 2024/25

1. PODSTAWOWE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

Nazwa przedmiotu	Fizyka atomowa i molekularna w badaniach biologiczno-chemicznych
Kod przedmiotu*	
Nazwa jednostki prowadzącej kierunek	Kolegium Nauk Przyrodniczych
Nazwa jednostki realizującej przedmiot	Kolegium Nauk Przyrodniczych
Kierunek studiów	Systemy diagnostyczne w medycynie
Poziom studiów	studia pierwszego stopnia, inż.
Profil	ogólnoakademicki
Forma studiów	stacjonarne
Rok i semestr/y studiów	rok II, semestr 4
Rodzaj przedmiotu	kierunkowy
Język wykładowy	polski
Koordinator	dr hab. Przemysław Kolek, prof. UR
Imię i nazwisko osoby prowadzącej / osób prowadzących	dr hab. Wojciech Szajna, prof. UR, dr Izabela Piotrowska

* -opcjonalnie, zgodnie z ustaleniami w Jednostce

1.1. Formy zajęć dydaktycznych, wymiar godzin i punktów ECTS

Semestr (nr)	Wykł.	Ćw.	Konw.	Lab.	Sem.	ZP	Prakt.	Inne (jakie?)	Liczba pkt. ECTS
4	30	15		15					5

1.3. SPOSÓB REALIZACJI ZAJĘĆ ZAJĘCIA W FORMIE TRADYCYJNEJ ZAJĘCIA REALIZOWANE Z WYKORZYSTANIEM METOD I TECHNIK KSZTAŁCENIA NA ODLEGŁOŚĆ**1.4. FORMA ZALICZENIA PRZEDMIOTU (Z TOKU) (EGZAMIN, ZALICZENIE Z OCENĄ, ZALICZENIE BEZ OCENY)**

WYKŁAD – EGZAMIN

ĆWICZENIA - ZALICZENIE Z OCENĄ

ĆWICZENIA LAB. - ZALICZENIE Z OCENĄ

2. WYMAGANIA WSTĘPNE

ZNAJOMOŚĆ FIZYKI I MATEMATYKI W ZAKRESIE PRZEDMIOTÓW PROWADZONYCH NA KIERUNKU SDM W SEMESTRACH 1-3.

3. CELE, EFEKTY UCZENIA SIĘ, TREŚCI PROGRAMOWE I STOSOWANE METODY DYDAKTYCZNE

3.1. Cele przedmiotu

C ₁	opanowanie przez studenta zagadnień z fizyki atomowej i molekularnej, mających zastosowanie w badaniach biologiczno-chemicznych i medycynie
C ₂	ukazanie studentowi nierozzerwalnego związku między fizyką atomową i molekularną a biologią i chemią

3.2 Efekty uczenia się dla przedmiotu

EK (efekt uczenia się)	Treść efektu uczenia się zdefiniowanego dla przedmiotu	Odniesienie do efektów kierunkowych ¹
EK_o1	student zna i rozumie w zaawansowanym stopniu pojęcia i prawa z zakresu fizyki atomowej i molekularnej, a w szczególności: teorie fizyczne dotyczące struktury atomów i cząsteczek oraz ich oddziaływania z promieniowaniem elektromagnetycznym	K_Wo2
EK_o2	student potrafi analizować problemy z zakresu fizyki atomowej i molekularnej oraz znajdować ich rozwiązania w oparciu o poznane prawa i metody	K_Uo1
EK_o3	student potrafi utworzyć opracowanie przedstawiające określony problem z zakresu zastosowań fizyki atomowej i molekularnej w naukach biologiczno-chemicznych i medycynie oraz podać sposoby jego rozwiązania uwzględniając wstępną ocenę ekonomiczną proponowanych rozwiązań	K_Uo5
EK_o4	student potrafi planować i wykonywać proste badania doświadczalne, obserwacje lub symulacje komputerowe z zakresu fizyki atomowej i molekularnej oraz interpretować otrzymane wyniki i formułować na tej podstawie wnioski	K_Uo6
EK_o5	student potrafi w sposób przystępny przedstawić fakty dotyczące zastosowań fizyki atomowej i molekularnej w medycynie i technice	K_U10
EK_o6	student jest gotów do uznania ograniczeń własnej wiedzy i potrzeby zasięgnięcia opinii ekspertów w przypadku trudności z samodzielnym rozwiązaniem problemu	K_Ko1

3.3 Treści programowe

A. Problematyka wykładu

Treści merytoryczne

Wstęp do kwantowej teorii materii

Doświadczalne podstawy teorii kwantów, atomistyczna struktura materii, powstanie teorii kwantów, sukcesy i niepowodzenia teorii Bohra. Podstawy spektroskopii atomowej: wzór

¹ W przypadku ścieżki kształcenia prowadzącej do uzyskania kwalifikacji nauczycielskich uwzględnić również efekty uczenia się ze standardów kształcenia przygotowującego do wykonywania zawodu nauczyciela.

Rydberga dla atomów wodoropodobnych, zasada kombinacyjna Ritza. Atom wodoru i jony wodoropodobne, dualizm korpuskularno-falowy, hipoteza de Broglie'a, podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej, zasada nieoznaczoności Heisenberga.

Kwantowo-mechaniczne podstawy teorii układów jednoelektronowych. Funkcja falowa i równanie Schrödingera. Równanie Schrödingera dla atomu wodoru, liczby kwantowe dla atomu wodoru, poziomy energii i widmo emisyjne atomu wodoru, funkcje falowe dla atomu wodoru. Liczby kwantowe elektronu w atomach jednoelektronowych oraz kwantowane przez nie wielkości fizyczne. Geometryczne właściwości orbitali w atomach i jonach wodoropodobnych, gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w określonym punkcie w atomie. Spin elektronu, pojęcie spinorbitalu.

Podstawy teorii układów wieloelektronowych. Budowa atomów wieloelektronowych Multipletowość układu wieloelektronowego, nierozróżnialność cząstek, zasada nierozróżnialności jednakowych cząstek, fermiony i bozony, przybliżenie jednoelektronowe, zakaz Pauliego. Funkcja wieloelektronowa, wyznaczniki Slatera. Efektywne energie orbitalne, metoda pola samouzgodnionego, równania Hartree-Focka. Konfiguracje elektronowe atomów wieloelektronowych, pojęcie konfiguracji elektronowej zamknięto- i otwartopowłokowej, reguła Hunda. Stany energetyczne atomów wieloelektronowych, definicja termu atomowego, stan atomu wieloelektronowego, struktura subtelna widma emisyjnego, reguły wyboru dla przejść optycznych, wyznaczanie termów, efekt pola magnetycznego, korelacja elektronów w atomach, metoda oddziaływania konfiguracji, inne metody uwzględniania korelacji elektronów.

Stany rotacyjne cząsteczek

Rozdzielenie ruchu jąder atomowych i ruchów elektronów w cząsteczkach, przybliżenie adiabatyczne i Borna-Oppenheimera. Rozdzielenie rotacji i oscylacji cząsteczki. Cząsteczka dwuatomowa i cząsteczka liniowa w przybliżeniu rotatora sztywnego. Kwantowanie poziomów rotatora, stała rotacyjna. Term rotacyjny cząsteczki w przybliżeniu rotatora sztywnego a częstości linii w widmie rotacyjnym. Obsadzenie termiczne poziomów rotacyjnych. Reguły wyboru dla przejść rotacyjnych. Momenty przejść rotacyjnych a intensywności przejść (wpływ i obsadzeń termicznych). Efekty izotopowe w widmach rotacyjnych: wpływ podstawienia izotopowego na wartości stałych rotacyjnych.

Cząsteczka jako rotator niesztywny – pierwsza poprawka niesztywności rotatora. Term rotacyjny cząsteczki w przybliżeniu rotatora niesztywnego a częstości linii w widmie rotacyjnym.

Stany oscylacyjne cząsteczek

Potencjały modelowe dla oscylacji w cząsteczce dwuatomowej, potencjał Morse'a. Cząsteczka dwuatomowa w przybliżeniu oscylatora harmonicznego. Kwantowanie poziomów energetycznych oscylatora i reguły przejść. Wpływ podstawień izotopowych na częstość drgań cząsteczki.

Cząsteczka jako oscylator anharmoniczny – pierwsza poprawka anharmoniczna. Energia dysocjacji i energia poziomu zerowego. Term oscylacyjny cząsteczki w przybliżeniu harmonicznym i anharmonicznym oraz liczby falowe dla przejść w progresjach i w sekwencjach. Widmo oscylacyjno-rotacyjne cząsteczek.

Struktura elektronowa cząsteczek

Metody orbitali molekularnych, symetria orbitali molekularnych, gęstości elektronowe, model orbitalny a schemat wzbudzeń elektronowych, energia korelacji elektronów w cząsteczkach, zastosowanie metody orbitali molekularnych do dwuatomowych cząsteczek homojądrowych, w przybliżeniu jednoelektronowym, poziomy energii w ramach prostego opisu orbitali molekularnych, zasada budowania konfiguracji elektronowych. Przybliżenie wieloelektronowe dla cząsteczek liniowych: symbole termów molekularnych, widmo elektronowe cząsteczek

homojądrowych, zastosowanie metody orbitali molekularnych do prostych cząsteczek heterojądrowych, prosty opis molekularny, zasada budowania konfiguracji elektronowych, cząsteczki wieloatomowe i kierunkowość wiązań chemicznych, prosty opis wybranych cząsteczek metodą orbitali molekularnych, zlokalizowane orbitale molekularne, hybrydyzacja orbitali atomowych, hybrydyzacja orbitali atomu węgla, przewidywania struktury geometrycznej prostych cząsteczek. Cząsteczki mające sprzężone wiązania podwójne, wiązania w związkach węgla, cząsteczka benzenu – opis za pomocą metody orbitali molekularnych i metody wiązań walencyjnych. Związki kompleksowe, teoria pola krystalicznego, teoria pola ligandów.

Oddziaływania międzycząsteczkowe. Oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy jonami oraz cząsteczkami obojętymi. Ładunek jonu i moment dipolowy cząsteczki. Oddziaływania kulombowskie pomiędzy jonami. Oddziaływania Van der Waalsa: oddziaływania orientacyjne typu jon – dipol oraz dipol-dipol, oddziaływania indukcyjne typu jon-dipol indukowany oraz dipol trwały – dipol indukowany, oddziaływania dyspersyjne Londona a korelacja elektronów. Moment dipolowy (polarność/ niepolarność) cząsteczek a właściwości fizyczne i chemiczne substancji oraz ich rozpuszczalność w wodzie/węglowodorach i tłuszczach. Specyficzne i kierunkowe oddziaływania międzycząsteczkowe za pośrednictwem wiązań wodorowych. Elektrostatyczna oraz kwantowomechaniczna interpretacja wiązań wodorowych. Rola oddziaływań międzycząsteczkowych w biologii molekularnej i genetyce.

Oddziaływanie atomów i cząsteczek z polem elektrostatycznym i magnetycznym efekt Starka i Efekt Zeemana. Podstawy fizyczne spektroskopii rezonansów magnetycznych. Podstawy spektroskopii EPR – oddziaływanie niesparowanych elektronów z zewnętrznym polem magnetycznym. Podstawy spektroskopii NMR – indukcja magnetyczna pola zewnętrznego B_0 , pole wyindukowane B_{ind} oraz pole efektywne B_{eff} . Przesunięcie chemiczne w widmach NMR. Intensywności integralne sygnałów MNR – liczba atomów wodoru w pozycjach równoważnych. Sprzężenie spin-spin w widmach NMR – rozszczepienie multipletowe. Typowe przesunięcia chemiczne w widmach NMR. Badanie struktury cząsteczek chemicznych. Zastosowania spektroskopii rezonansów magnetycznych w chemii, biologii i medycynie.

Fizyczne podstawy oraz zastosowania spektrometrii mas (spektrometrii masowej). Ruch cząstek naładowanych i jonów w polu elektrostatycznym i magnetycznym: trajektorie oraz przyspieszenia, prędkości i czas przelotu cząstek i jonów w tych polach. Wyznaczanie stosunku masy do ładunku dla zjonizowanych atomów (odkrycie izotopów) ora jonów molekularnych. Metody jonizacji próbek. Informacje strukturalne i identyfikacja cząsteczek na podstawie widma spektrometrii masowej: ścieżki fragmentacji cząsteczek organicznych i biocząsteczek. Zastosowania spektrometrii masowej w badaniach biologicznych, medycznych i chemicznych.

Fizyczne podstawy oraz zastosowania atomowej spektrometrii absorpcyjnej i emisyjnej. Zasada działania i budowa aparatury do atomowej spektrometrii emisyjnej i absorpcyjnej. Zastosowanie lamp spektralnych z wydrążoną katodą (*hollow cathode lamp, HCL*), emitujących promieniowanie charakterystyczne poszczególnych pierwiastków do selektywnego wzbudzenia i wykrywania atomów metali ciężkich. Techniki atomizacji próbek. Zastosowanie metod spektroskopii atomowej w toksykologii i badania zanieczyszczeń środowiska, do wykrywania śladowych ilości toksycznych pierwiastków ciężkich: Hg, Cd, Pb, As, itp.

Fizyczne podstawy oraz zastosowania spektrometrii fotoelektronów XPS i UPS oraz spektroskopii rentgenowskiej. Wzbudzenia i jonizacja atomów pod wpływem promieniowania z zakresu dalekiego ultrafioletu i promieniowania rentgenowskiego. Bilans energetyczny w spektroskopii fotoelektronów, pomiar energii kinetycznej fotoelektronów. Wtórna emisja fotoelektronów – zjawisko Auger'a. Emisja promieniowania rentgenowskiego na skutek przejść elektronów z zewnętrznych powłok na powłoki wewnętrzne – fluorescencja rentgenowska.

Zastosowania spektroskopii fotoelektronów i spektroskopii rentgenowskiej w badaniach chemicznych: analiza składu pierwiastkowego próbek, badanie stanu walencyjnego i hybrydyzacji atomów.

B. Problematyka ćwiczeń

Treści merytoryczne
Wstęp do kwantowej teorii materii. dualizm korpuskularno-falowy, obliczanie długości fali de Broglie'a, obliczenia energii, prędkości i promieni orbit w modelu Bohra.
Podstawy teorii układów jedno- i wieloelektronowych. Liczby kwantowe i obliczanie całkowitej energii, wartości momentu pędu, rzutu momentu pędu na wyróżnioną oś oraz wartości spinu elektronu i jego rzutu dla elektronu w różnych stanach kwantowych w atomie. Ustalanie postaci orbitalnej funkcji falowej i symbolika zapisu powłok, podpowłok i orbitali dla podanych wartości liczb kwantowych. Orbitale rzeczywiste i orbitale zespolone.
Budowa atomów wieloelektronowych. Konfiguracje atomów wielo elektronowych a termy atomowe w sprzężeniu L-S dla konfiguracji zamknięto powłokowych, oraz p^2 , p^4 , d^2 i d^8 .
Stany rotacyjne cząsteczek. Obliczanie stałej rotacyjnej i stałej nieszttywności rotatora oraz częstości linii rotacyjnych w widmie.
Stany oscylacyjne cząsteczek . Obliczanie stałej siłowej, masy zredukowanej i częstości w widmie oscylacyjnym cząsteczek w przybliżeniu harmonicznym. Obliczenia częstości w progresjach i sekwencjach przejść oscylacyjnych oraz pierwszej stałej anharmoniczności i energii dysocjacji cząsteczek dwuatomowych.
Struktura elektronowa cząsteczek. Teoria orbitali molekularnych, diagramy orbitali molekularnych oraz konfiguracje i termy cząsteczek dwuatomowych. Hybrydyzacje atomów węgla, azotu i tlenu w cząsteczkach nieorganicznych i organicznych oraz ich związek z geometrią cząsteczek i ich właściwościami fizycznymi i chemicznymi.
Oddziaływanie atomów i cząsteczek z polem elektrostatycznym i magnetycznym, rozszczepienia poziomów energetycznych. Ruch jonów w polu elektrostatycznym i magnetycznym: obliczanie trajektorii i oraz przyspieszenia, prędkości i czasu przelotu jonów molekularnych w tych polach i wyznaczanie stosunku masy do ładunku dla tych jonów.

C. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych

Treści merytoryczne
Badanie widma emisyjnego atomu wodoru
Analiza widma oscylacyjno-rotacyjnego cząsteczki dwuatomowej
Jakościowa analiza spektralna – identyfikacja pierwiastków występujących w świetlówkach, neonówkach i lampach sodowych na podstawie pomiaru widma emisyjnego.
Zapoznanie z aparaturą do atomowej spektrometrii absorpcyjnej UV-vis, fluorescencji rentgenowskiej i spektrometrii masowej oraz ich zastosowaniami w badaniach biologiczno-chemicznych.

3.4 Metody dydaktyczne

WYKŁAD: WYKŁAD Z PREZENTACJĄ MULTIMEDIALNĄ, WYKŁAD PRZY TABLICY.

ĆWICZENIA: ĆWICZENIA RACHUNKOWE.

ĆWICZENIA LAB.: WYKONYWANIE DOŚWIADCZEŃ ORAZ OBLICZENIA I OPRACOWANIE WYNIKÓW

4. METODY I KRYTERIA OCENY

4.1 Sposoby weryfikacji efektów uczenia się

Symbol efektu	Metody oceny efektów uczenia się (np.: kolokwium, egzamin ustny, egzamin pisemny, projekt, sprawozdanie, obserwacja w trakcie zajęć)	Forma zajęć dydaktycznych (w., ćw., ...)
EK_01	KOLOKWIA, EGZAMIN	W., ĆW.,
EK_02	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIMUM, SPRAWOZDANIE, EGZAMIN	W., LAB., ĆW.
EK_03	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIMUM, SPRAWOZDANIA	W., ĆW.
EK_04	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIMUM, SPRAWOZDANIE	ĆW., LAB.
EK_05	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIMUM, EGZAMIN	W., ĆW.
EK_06	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIMUM, EGZAMIN	ĆW.

4.2 Warunki zaliczenia przedmiotu (kryteria oceniania)

Zaliczenie przedmiotu odbywa się poprzez kolokwia, sprawozdania, aktywność na zajęciach i udział w dyskusji. Potwierdzi ona stopień osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się. Weryfikacja osiąganych efektów uczenia się kontrolowana jest na bieżąco w trakcie realizacji zajęć. Ocena uzyskana z zaliczenia przedmiotu pozwoli ocenić stopień osiągniętych efektów.

Wykład – egzamin pisemny zawierający także zagadnienie otwarte.

Egzamin jest zaliczony po zdobyciu przez studenta minimum 50% punktów.

Ćwiczenia – ocena końcowa jest oceną uzyskaną na kolokwium pisemnym. Brana jest także pod uwagę aktywność studenta na zajęciach, która może podnieść ocenę o pół stopnia.

Ćwiczenia lab. – ocena końcowa jest średnią arytmetyczną ocen z poszczególnych ćwiczeń. Ocena z każdego ćwiczenia jest średnią z ustnego kolokwium wstępnego, sprawozdania z ćwiczenia oraz oceny pracy studenta na zajęciach laboratoryjnych.

5. CAŁKOWITY NAKŁAD PRACY STUDENTA POTRZEBNY DO OSIĄgniĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW W GODZINACH ORAZ PUNKTACH ECTS

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny z harmonogramu studiów	60
Inne z udziałem nauczyciela akademickiego (udział w konsultacjach, egzaminie)	10
Godziny niekontaktowe – praca własna studenta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	55
SUMA GODZIN	125
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS	5

* Należy uwzględnić, że 1 pkt ECTS odpowiada 25-30 godzin całkowitego nakładu pracy studenta.

6. PRAKTYKI ZAWODOWE W RAMACH PRZEDMIOTU

wymiar godzinowy	n.d.
zasady i formy odbywania praktyk	n.d.

7. LITERATURA

LITERATURA PODSTAWOWA:

1. Kołos W., Sadlej J., *Atom i cząsteczka*, WNT, 2007.
2. Sadlej J., *Spektroskopia molekularna*, WNT, 2002.
3. Hryniewicz A., Rokita E., *Fizyczne metody badań w biologii, medycynie i ochronie środowiska*, PWN, 2013.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

1. Atkins P.W., *Chemia fizyczna*, PWN, 2016.
2. K. Pigoń, Z. Ruziewicz „Chemia Fizyczna” Tom II „Fizykochemia molekularna” PWN2005

Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej