

**SYLABUS**

DOTYCZY CYKLU KSZTAŁCENIA 2021/22-2024/25

(skrajne daty)

Rok akademicki 2022/23

**1. PODSTAWOWE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE**

Nazwa przedmiotu	<b>Fizyka atomowa i molekularna w badaniach biologiczno-chemicznych</b>
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
Koordynator	<b>dr hab. Przemysław Kolek, prof. UR</b>
Imię i nazwisko osoby prowadzącej / osób prowadzących	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

C1	opanowanie przez studenta zagadnień z fizyki atomowej i molekularnej, mających zastosowanie w badaniach biologiczno-chemicznych i medycynie
C2	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 <sup>1</sup>
EK_01	student zna i rozumie podstawowe 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_W02
EK_02	student potrafi analizować problemy z zakresu fizyki atomowej i molekularnej oraz znajdować ich rozwiązania w oparciu o poznane prawa i metody	K_U01
EK_03	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_U05
EK_04	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_U06
EK_05	student potrafi w sposób przystępny przedstawić podstawowe fakty w ramach zastosowań fizyki atomowej i molekularnej w medycynie i technice	K_U10
EK_06	student jest gotów do uznania ograniczeń własnej wiedzy i potrzeby zasięgnięcia opinii ekspertów w przypadku trudności z samodzielnym rozwiązaniem problemu	K_K01

#### 3.3 Treści programowe

##### A. Problematyka wykładu

<b>Treści merytoryczne</b>
<b>Wstęp do kwantowej teorii materii</b> Doświadczalne podstawy teorii kwantów, atomistyczna struktura materii, powstanie teorii kwantów, sukcesy i niepowodzenia teorii Bohra. Podstawy spektroskopii atomowej: wzór Rydberga dla atomów wodoropodobnych, zasada kombinacyjna Ritza. Atom wodoru i jony wodoropodobne, dualizm korpuskularno-falowy, hipoteza de Broglie'a, podstawowe pojęcia

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

<p>mechaniki kwantowej, zasada nieoznaczoności Heisenberga.</p>
<p><b>Kwantowo-mechaniczne podstawy teorii układów jednoelektronowych.</b> 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.</p>
<p><b>Podstawy teorii układów wieloelektronowych. Budowa atomów wieloelektronowych</b>          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.</p>
<p><b>Stany rotacyjne cząsteczek</b>          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.</p>
<p><b>Stany oscylacyjne cząsteczek</b>          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.</p>
<p><b>Struktura elektronowa cząsteczek</b>          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</p>

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 obojętnymi. 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 niesztywności 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 świetłówkach, 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	KOŁOKWIA, EGZAMIN	w., ćw.,

EK_02	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIUM, SPRAWOZDANIE, EGZAMIN	W., LAB., ĆW.
EK_03	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIUM, SPRAWOZDANIA	W., ĆW.
EK_04	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIUM, SPRAWOZDANIE	ĆW., LAB.
EK_05	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIUM, EGZAMIN	W., ĆW.
EK_06	OBSERWACJA W TRAKCIE ZAJĘĆ, KOLOKWIUM, 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 kontaktowe wynikające 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
<b>SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS</b>	<b>5</b>

\* 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. Hrynkiewicz 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