

SYLABUS PRZEDMIOTU – SZKOŁA DOKTORSKA

| | |
|---|--|
| Nazwa przedmiotu | Spektroskopia atomowa i molekularna |
| Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot | Szkoła Doktorska |
| Rodzaj przedmiotu (<i>obowiązkowy, fakultatywny</i>) | Przedmiot obowiązkowy, fakultatywny, specjalistyczny do wyboru |
| Rok i semestr studiów | Rok II sem. I |
| Imię i nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) przedmiot | Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR |
| Imię i nazwisko osoby egzaminującej, lub udzielającej zaliczenia w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca przedmiot | - |
| Wymagania wstępne | Wiedza i umiejętności z zakresu zaawansowanej mechaniki kwantowej, fizyki atomowej i molekularnej, metod matematycznych fizyki oraz chemii będące wymaganymi efektami kształcenia na poziomie studiów II stopnia na kierunku Fizyka. |
| Efekty kształcenia dla przedmiotu | |
| Zakładane efekty kształcenia | Odniesienie do efektów kształcenia dla programu studiów doktoranckich |
| <p style="text-align: center;">Wiedza:</p> <p>Doktorant zna i rozumie zaawansowane zagadnienia spektroskopii atomowej i molekularnej w stopniu umożliwiającym rewizję istniejących paradygmatów zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych.</p> <p>Zna i rozumie główne tendencje rozwojowe współczesnej spektroskopii atomowej i molekularnej.</p> <p style="text-align: center;">Umiejętności:</p> <p>Doktorant potrafi wykorzystywać wiedzę z różnych dziedzin nauki do twórczego identyfikowania i innowacyjnego rozwiązywania złożonych problemów lub wykonywania zadań o charakterze badawczym w obszarze spektroskopii atomowej i molekularnej, a w szczególności: (i) definiować cel i przedmiot badań naukowych; (ii) formułować hipotezę badawczą; (iii) rozwijać metody, techniki narzędzia badawcze oraz twórczo je stosować; (iv) wnioskować na podstawie badań naukowych.</p> <p>Doktorant umie inicjować debatę dotyczącą zaawansowanych zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.</p> <p>Umie uczestniczyć w dyskursie naukowym w</p> | <p>P8S-WG/1</p> <p>P8S-WG/2</p> <p>P8S-UW/1</p> <p>P8S-UK/3</p> <p>P8S-UK/4</p> |

dziedzinie zaawansowanych zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.

Kompetencje społeczne:

Doktorant jest gotów do uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych na przykładzie zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.

P8S-KK/3

Forma(y) zajęć, liczba realizowanych godzin

Wykład – 5 godzin

Ćwiczenia – 10 godzin

Treści programowe

A. Problematyka wykładu (5 godzin)

Treści merytoryczne:

1. Zaawansowana spektroskopia atomowa
 - 1.1. Atomy w polu magnetycznym: doświadczenia i ich półklasyczny opis.
 - 1.2. Atomy w polu magnetycznym: opis w ramach mechaniki kwantowej.
 - 1.3. Atomy w polu elektrycznym. Ogólne prawa przejść optycznych.
 - 1.4. Laser.
2. Rozdzielenie ruchu jąder i elektronów w cząsteczkach.
 - 2.1. Równanie Schrödingera dla ruchu jąder.
 - 2.2. Rozdzielenie rotacji i oscylacji.
 - 2.3. Przybliżone wartości własne całkowitego hamiltonianu.
 - 2.4. Poziomy energii spinu elektronów i jąder
 - 2.5. Hamiltonian efektywny.
 - 2.6. Przybliżenie adiabatyczne.
 - 2.7. Przybliżenie Borna-Oppenheimera.
3. Makroskopowe i mikroskopowe właściwości elektryczne i magnetyczne cząsteczek.
 - 3.1. Makroskopowe właściwości elektryczne cząsteczek.
 - 3.2. Polaryzowalność. Indukowany elektryczny moment dipolowy cząsteczki
 - 3.3. Mikroskopowa teoria momentów multipolowych cząsteczki.
 - 3.4. Oddziaływanie elektrycznych momentów multipolowych z zewnętrznym polem elektrycznym.
4. Spektroskopia elektronowa molekuł dwu i wielo-atomowych.
 - 4.1. Struktura elektronowa cząsteczek.
 - 4.2. Klasyfikacja spektroskopowa stanów elektronowych.
 - 4.3. Widma elektronowe.
 - 4.4. Intensywność przejść elektronowych, reguły wyboru.
 - 4.5. Dysocjacja i predysocjacja.
 - 4.6. Efekt izotopowy w widmach elektronowych.
 - 4.7. Zastosowania widm elektronowych.

B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych (10 godzin)

Treści merytoryczne:

| | | |
|--|---|-------|
| Rozwiązywanie zadanych problemów za pomocą współczesnych metod obliczeniowych spektroskopii atomowej i molekularnej. Na ćwiczeniach audytoryjnych będą rozwiązywane zadania zgodne z tematyką zagadnień omawianych podczas wykładów. | | |
| Stosowane metody dydaktyczne | <ul style="list-style-type: none"> - prezentacja - dyskusja - rozwiązywanie zadań obliczeniowych - rozwiązywanie problemów | |
| Metody sprawdzania i oceny efektów kształcenia uzyskanych przez doktorantów, w tym forma i warunki zaliczenia przedmiotu | <p>Ocena zaliczeniowa z ćwiczeń na podstawie ocen cząstkowych:</p> <ul style="list-style-type: none"> -ocena bardzo dobra: student opanował ponad 90% zakresu wiedzy; umie rozwiązywać zadania rachunkowe; - ocena dobra: student opanował ponad 70% zakresu wiedzy i potrafi rozwiązywać typowe zadania rachunkowe; -ocena dostateczna: student zna podstawowe pojęcia dotyczące przedmiotu; potrafi rozwiązywać proste zadania rachunkowe. | |
| Całkowity nakład pracy doktoranta potrzebny do osiągnięcia założonych efektów w godzinach oraz punktach ECTS | Liczba godzin w bezpośrednim kontakcie z nauczycielem (wg planu studiów) | 15 |
| | Praca własna doktoranta | 15 |
| | SUMA GODZIN | 30 |
| | Liczba pkt. ECTS | _____ |
| Język wykładowy | polski | |
| Literatura | <p>Literatura podstawowa:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. J. Sadlej „Spektroskopia molekularna”, WNT, 2002 2. W. Kołos, J. Sadlej „Atom i cząsteczka”, WNT, 1998 3. W. Kołos „Chemia kwantowa”, PWN, 1978 3. P. W. Atkins „Chemia fizyczna”, PWN, 2001 4. H. Haken, H. Ch. Wolf „Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej”, PWN, 1998. 5. H. Haken, H. Ch. Wolf „Atomy i kwanty”, PWN, 2002 (2 wyd.) 5. P. Kowalczyk „Fizyka cząsteczek”, PWN 6. A. Gołębiewski „Elementy mechaniki i chemii kwantowej”, PWN, 1982. | |

7. Z. Leś „Wstęp do spektroskopii atomowej”.

Literatura uzupełniająca:

1. G. Gauglitz, D.S.Moore, Handbook of Spectroscopy, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2014.