

SYLABUS PRZEDMIOTU – SZKOŁA DOKTORSKA
CYKL KSZTAŁCENIA OD 2020 DO 2024
CYKL KSZTAŁCENIA OD 2021 DO 2025

OGÓLNE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE				
Tytuł przedmiotu	Spektroskopia atomowa i molekularna			
Nazwa jednostki realizującej przedmiot	Szkoła Doktorska w Uniwersytecie Rzeszowskim			
Typ przedmiotu (<i>obowiązkowy, fakultatywny</i>)	Przedmiot obowiązkowy fakultatywny (specjalistyczny) do wyboru			
Rok/semestr	2022/2023; semestr IV i VI			
Dyscyplina	Nauki fizyczne			
Język wykładowy	j. polski			
Imię i nazwisko koordynatora przedmiotu	Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR			
Imię i nazwisko prowadzącego przedmiot	Dr hab. Rafał Hakalla, prof. UR			
Wymagania wstępne	Wiedza i umiejętności z zakresu podstaw fizyki, metod matematycznych fizyki oraz mechaniki kwantowej, będące wymaganymi efektami kształcenia na poziomie studiów II stopnia na kierunku <i>fizyka</i> .			
STRESZCZENIE PRZEDMIOTU (syntetyczny opis treści oraz celów przedmiotu; 100-200 słów)				
<p>Niniejszy kurs wprowadza słuchaczy w kluczowe zagadnienia służące interpretacji widm atomów i molekuł, a poprzez to w poznanie struktury badanych cząstek. Aby ten cel mógł zostać zrealizowany, przedstawione zostaną rezultaty doświadczalne, a także model teoretyczny, w ramach którego są one wytłumaczone. Zaproponowana zostanie także synteza pomiędzy teorią, a doświadczeniem, czyli znalezienie relacji pomiędzy mierzonymi parametrami widma, a mikroskopowymi właściwościami cząsteczek. Synteza taka ma doprowadzić do prawidłowej interpretacji wyników doświadczalnych i poznania struktury kwantowo-mechanicznej badanych obiektów.</p>				
EFEKTY UCZENIA SIĘ DLA PRZEDMIOTU I METODY WERYFIKACJI				
Symbol efektu uczenia się	Zakładane efekty uczenia się	Odniesienie do efektów uczenia się dla kwalifikacji na poziomie 8 PRK (symbol)	Forma zajęć dydaktycznych (w., ćw., itp.)	Metody weryfikacji (np.: kolokwium, egzamin ustny, egzamin pisemny, projekt itp.)
Wiedza Lp.	Zna i rozumie			
1	Zaawansowane zagadnienia spektroskopii atomowej i molekularnej w stopniu umożliwiającym rewizję istniejących paradygmatów zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych.	P8S-WG/1	w	projekt
2	Główne tendencje rozwojowe współczesnej spektroskopii atomowej i molekularnej.	P8S-WG/2	w	projekt

3	Metodologię badań stosowanych w zagadnieniach spektroskopii atomowej i molekularnej.	P8S-WG/3	w, ćw	projekt
Umiejętności Lp.	Potrafi			
1	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.	P8S-UW/1	ćw	projekt
2	Dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań spektroskopii atomowej i molekularnej, działalności eksperckiej i innych prac o charakterze twórczym oraz ich wkładu w rozwój wiedzy.	P8S-UW/2	ćw	projekt
3	Komunikować się na tematy związane ze spektroskopią atomową i molekularną w stopniu umożliwiającym aktywne uczestnictwo w międzynarodowym środowisku naukowym.	P8S-UK/1	ćw	projekt
4	Upowszechniać wyniki działalności naukowej w dziedzinie spektroskopii atomowej i molekularnej, także w formach popularnych.	P8S-UK/2	ćw	projekt
5	Inicjować debatę dotyczącą zaawansowanych zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.	P8S-UK/3	w, ćw	projekt
6	Uczestniczyć w dyskursie naukowym w dziedzinie zaawansowanych zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.	P8S-UK/4	w, ćw	projekt
7	Posługiwać się językiem angielskim na poziomie B2 Europejskiego Systemu Kształcenia Językowego w stopniu umożliwiającym uczestnictwo w międzynarodowym środowisku naukowym związanym ze spektroskopią atomową i molekularną.	P8S-UK/5	ćw	projekt
Kompetencje społeczne Lp.	Jest gotów do			
1	Krytycznej oceny dorobku w ramach osiągnięć spektroskopii atomowej i	P8S-KK/1	w, ćw	projekt

	molekularnej.			
2	Uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych na przykładzie zagadnień spektroskopii atomowej i molekularnej.	P8S-KK/3	w, ćw	projekt
3	Inicjowania działań na rzecz interesu publicznego.	P8S-KO/2	w, ćw	projekt

FORMY ZAJĘĆ DYDAKTYCZNYCH, WYMIAR GODZIN I PUNKTÓW1

Semestr (nr)	Wykł.	Ćwiczenia	Lab.	Prakt.	Inne	Liczba pkt. ECTS
IV i VI	5	10	—	—	—	0

METODY DYDAKTYCZNE

- prezentacja
- dyskusja
- rozwiązywanie zadań obliczeniowych
- rozwiązywanie problemów

TREŚCI PROGRAMOWE

A. Problematyka wykładu (5 godzin)

Treści merytoryczne:

1. 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. Lasery.
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 adiabaticzne.
 - 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.
 - 4.8.

B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych (10 godzin)**Treści merytoryczne:**

Rozwiązywanie zadanych problemów za pomocą współczesnych metod obliczeniowych spektroskopii atomowej i molekularnej. Zadania zostaną wybrane odpowiednio do tematyki wykładów.

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU (KRYTERIA OCENIANIA)

Końcowa ocena z ćwiczeń wystawiona zostanie na podstawie ocen cząstkowych:

- *bardzo dobry*: student opanował ponad 90% zakresu wiedzy; umie rozwiązywać zadania rachunkowe;
- *dobry*: student opanował ponad 70% zakresu wiedzy i potrafi rozwiązywać typowe zadania rachunkowe;
- *dostateczny*: student zna podstawowe pojęcia dotyczące przedmiotu oraz potrafi rozwiązywać proste zadania rachunkowe.

CAŁKOWITY NAKŁAD PRACY DOKTORANTA POTRZEBNY DO OSIĄGNIĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW W GODZINACH ORAZ PUNKTACH ECTS

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny realizowane w kontakcie bezpośrednim wynikające z planu z studiów	15
Inne z udziałem nauczyciela (udział w konsultacjach, egzaminie)	5
Godziny realizowane samodzielnie przez doktoranta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	15
SUMA GODZIN	35
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS	0

LITERATURA

Literatura podstawowa:	<ol style="list-style-type: none"> 1. P. W. Atkins, <i>Chemia fizyczna</i>, PWN, 2022. 2. G. Gauglitz, D. S. Moore, <i>Handbook of Spectroscopy</i>, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2014. 3. J. Sadlej, <i>Spektroskopia molekularna</i>, WNT, 2002. 4. W. Kołos, J. Sadlej, <i>Atom i cząsteczka</i>, WNT, 1998. 5. G. Herzberg, <i>Molecular Spectra and Molecular Structure, vol. I: Spectra of Diatomic Molecules</i>, (2nd edition), Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 1989. 6. H. Haken, H. Ch. Wolf, <i>Atomy i kwanty</i> (2 wyd.), PWN, 2002. 7. H. Haken, H. Ch. Wolf, <i>Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej</i>, PWN, 1998. 8. Z. Leś, <i>Podstawy fizyki atomu. Wprowadzenie do współczesnej spektroskopii atomowej</i>, PWN, 2015.
Literatura uzupełniająca:	<ol style="list-style-type: none"> 1. P. Kowalczyk, <i>Fizyka cząsteczek. Energie i widma</i>, PWN, 2000. 2. W. Demtröder, <i>Atoms, Molecules and Photons An Introduction to Atomic-, Molecular- and Quantum Physics</i>, Springer Verlag, 2010.

10.09.2022

Rafał Hakalla

.....
Data i podpis prowadzącego przedmiot

.....
Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej