POLITECHNIKA GDAŃSKA

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Spektroskopia, PG_00038884		
Kierunek studiów	Chemia		
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2022/2023
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS	4.0
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	egzamin
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej		
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski	
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		

Formy zajęć i metody nauczania

Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60

W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0

Aktywność studenta i liczba godzin pracy

Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM
Liczba godzin pracy studenta	60	10.0	30.0	100

Cel przedmiotu

Celem przedmiotu jest zaznajomienie studentów z podstawami teoretycznymi wybranych działów spektroskopii molekularnej oraz praktycznym zastosowaniem analizy widmowej i obliczeń kwantochemicznych w fizykochemii molekularnej.

Efekty uczenia się przedmiotu

Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
[K7_U04] potrafi dokonać analizy sposobu funkcjonowania urządzeń, aparatury i linii technologicznych stosowanych w laboratoriach i przemyśle chemiczny, potrafi rozpoznać oraz zaproponować metody rozwiązania zadań projektowych, w tym nietypowych, uwzględniając ich aspekty pozatechniczne potrafi wybrać i wykorzystać rutynowe metody, aparaturę chemiczną i narzędzia do rozwiązania zadania projektowego – w tym naukowego.	Student dokonuje pomiarów widm molekularnych technikami NMR, IR i UV-VIS, oblicza takie widma molekularne metodami kwantowochemicznymi oraz poprawnie interpretuje uzyskane wyniki w kontekście struktury cząsteczkowej badanych związków.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania
[K7_W05] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie fizyki, obejmującą zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędną do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania rozmaitych problemów technicznych w tym pracy z taki urządzeniami jak mikroskopy elektronowe.	Student wykorzystuje wiedzę zdobytą na kursach fizyki i chemii teoretycznej i kwantowej do interpretacji procesów zachodzących w cząsteczce pod wpływem aborpcji lub emisji promieniowania elektromagnetycznego.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
[K7_W04] ma specjalistyczną wiedzę dotyczącą wybranych działów spektroskopii molekularnej oraz technik nanoskopowych, aspektów chemii bionieorganicznej, chemii kwantowej	Student posiada wiedzę na temat podstaw teoretycznych wybranych działów spektroskopii molekularnej (IR, NMR, UV/VIS).	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
[K7_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób	Student współpracuje z innymi członkami zespołu wykonującego doświadczenie, dokonuje podziału zadań pomiędzy członków zespołu, a następnie (wykorzystując wspólnie uzyskane wyniki eksperymentu) sporządza indywidualne sprawozdanie z wykonanego doświadczenia.	[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy

Treści przedmiotu

Podstawy metod spektroskopowych: światło jako fala elektromagnetyczna, oddziaływanie światła z materią: absorpcja, emisja, rozpraszanie, prawa absorpcji promieniowania, widma absorpcyjne i emisyjne. Spektroskopia rotacyjna: cząsteczki dwuatomowe (model rotatora sztywnego i niesztywnego), cząsteczki wieloatomowe, techniki pomiarowe i zastosowania. Spektroskopia oscylacyjna: oscylator harmoniczny i anharmoniczny, drgania normalne i charakterystyczne, struktura rotacyjna, efekty izotopowe, reguły wyboru, efekt Ramana, aparatura do rejestracji widm oscylacyjnych, rejestracja widma metodą transformacji Fouriera, widma próbek gazowych, ciekłych i stałych, zastosowania spektroskopii oscylacyjnej: analiza jakościowa, wyznaczanie struktury cząsteczek, badanie oddziaływań międzycząsteczkowych. Spektrofotometria: stany elektronowe cząsteczek (podstawowe i wzbudzone), klasyfikacja przejść elektronowych, reguły wyboru, struktura rotacyjno-oscylacyjna, chromofory, widma emisyjne: fluorescencja, fosforescencja, diagram Jabłońskiego, reakcje fotochemiczne, fotodysocjacja, pomiar widm elektronowych absorpcyjnych i emisyjnych, zastosowania: analiza jakościowa i ilościowa, badanie oddziaływań międzycząsteczkowych. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego: pojęcie spinu jądrowego, opis kwantowy zjawiska, struktura widma, przesunięcie chemiczne, ekranowanie, sprzężenie spinowo-spinowe, relaksacja poprzeczna i podłużna, aparatura pomiarowa, zastosowanie widm 1H, zastosowanie widm innych wybranych jąder. Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego: podstawy teoretyczne i opis kwantowy zjawiska, rodzaje cząsteczek wykazujących widmo EPR, sposoby rejestracji widma, struktura subtelna i nadsubtelna, zastosowania.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Matematyka I, Fizyka I, Chemia fizyczna, Chemia teoretyczna I

Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się

Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
Sprawozdania z zajęć praktycznych	50.0%	50.0%
Egzamin końcowy z materiału wykładów	50.0%	50.0%

Zalecana lista lektur

Podstawowa lista lektur

1. Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN, Warszawa 1998.
2. J. Sadlej, Spektroskopia molekularna, WNT, Warszawa 2002.
3. W. Kołos, J. Sadlej, Atom i cząsteczka, WNT, Warszawa 2007.
4. H. Haken, H.C. Wolf, Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej, PWN, Warszawa 1998.

	Uzupełniająca lista lektur	1. Biofizyka. Wybrane zagadnienia wraz z ćwiczeniami, PWN, Warszawa 2008. 2. Fotochemia i spektroskopia optyczna. Ćwiczenia laboratoryjne, PWN, Warszawa 2009. 3. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wyd. Naukowe UMK, Toruń 2014.
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Prawa absorpcji Bougera-Lamberta i Lamberta-Beera, prawo addytywności absorpcji. Przybliżone zakresy energetyczne podstawowych metod spektroskopowych. Mechanizm Einsteina: absorpcja wymuszona, emisja wymuszona, emisja spontaniczna. Separacja elektronowego równania Schrödingera. Przybliżenie adiabatyczne i Borna-Oppenheimera. Separacja translacyjnych, rotacyjnych i oscylacyjnych stopni swobody. Model rotatora sztywnego. Poziomy energetyczne rotatora sztywnego, stała rotacyjna, term rotacyjny. Wpływ stanu oscylacyjnego cząsteczki na widma rotacyjne. Podstawowe informacje o widmach rotatorów wieloatomowych. Poziomy energetyczne kwantowego oscylatora harmonicznego, energia zerowa oscylacji. Energia oscylatora anharmonicznego, zmiana reguł wyboru. Anharmoniczność mechaniczna i elektryczna. Reguły wyboru w spektroskopii rotacyjno-oscylacyjnej. Pasma stokesowskie i antystokesowskie, intensywność pasm ramanowskich. Pomiary stopnia depolaryzacji i ich zastosowanie. Metodyka spektroskopii Ramana. Reguła Francka-Condona, przejścia elektronowe prostopadłe i adiabatyczne. Chromofory. Widma metali przejściowych, kompleksy wysoko- i niskospinowe. Widma emisyjne: fluorescencja, fosforescencja. Czynnik jądrowy i moment magnetyczny jądra. Przemiatanie polem i częstością w pomiarach NMR. Wektor magnetyzacji, relaksacja podłużna i poprzeczna.	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	