



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Spektroskopia molekularna, PG_00066059						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
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			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Od odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	0.0	0.0	45
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	45	5.0		25.0		75
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zaznajomienie studentów z podstawami teoretycznymi wybranych działów spektroskopii molekularnej oraz praktycznym zastosowaniem analizy widmowej i obliczeń kwantowochemicznych w fizykochemii molekularnej.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K7_W02] identyfikuje techniki analityczne adekwatne do rozwiązywania konkretnych zadań analitycznych – także w zakładzie produkcyjnym		Student posiada wiedzę na temat podstaw teoretycznych wybranych działów spektroskopii molekularnej (IR, NMR, UV/VIS, itd.).		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
	[K7_W03] rozpoznaje i opisuje zjawiska z zakresu fizyki, obejmującą elementy mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędne do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania problemów technicznych		Student wykorzystuje wiedzę zdobytą na kursach fizyki i chemii teoretycznej i kwantowej do interpretacji procesów zachodzących w cząsteczce pod wpływem absorpcji lub emisji promieniowania elektromagnetycznego.		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		
	[K7_U02] przygotowuje szczegółową dokumentację wyników realizacji samodzielnie prowadzonych eksperymentów oraz analizuje otrzymane wyniki, posługując się ze zrozumieniem fachowym słownictwem oraz przygotować i przekazywać informacje		Student sporządza indywidualne sprawozdanie z wykonanego doświadczenia obliczeniowego obejmującą opracowanie i dyskusję osiągniętych wyników w oparciu o dostępne dane eksperymentalne.		[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania		
[K7_U04] opracowuje i przekazuje informacje techniczne w postaci dokumentów tekstowych, arkuszy kalkulacyjnych, wykresów, schematów technologicznych oraz prezentacji multimedialnych, oraz przygotowuje wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną		Student oblicza widma molekularne (NMR, IR, UV-VIS, itd.) metodami kwantowochemicznymi oraz poprawnie interpretuje uzyskane wyniki w kontekście struktury cząsteczkowej badanych związków.		[SU1] Ocena realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi			

Treści przedmiotu	<p>Podstawy metod spektroskopowych: światło jako fala elektromagnetyczna, oddziaływanie światła z materią: absorpcja, emisja, rozpraszanie, prawa absorpcji promieniowania, widma absorpcyjne i emisyjne.</p> <p>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.</p> <p>Spektrofotometria: stany elektronowe cząsteczek (podstawowe i wzbudzone), klasyfikacja przejść elektronowych, reguły wyboru, struktura rotacyjno-oscyłacyjna, 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.</p>											
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka I, Fizyka I, Chemia fizyczna, Chemia teoretyczna I											
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Sposób oceniania (składowe)</th> <th>Próg zaliczeniowy</th> <th>Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Sprawozdania z zajęć praktycznych</td> <td>50.0%</td> <td>50.0%</td> </tr> <tr> <td>Egzamin końcowy z materiału wykładów</td> <td>50.0%</td> <td>50.0%</td> </tr> </tbody> </table>	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%		
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	<ol style="list-style-type: none"> Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN, Warszawa 1998. J. Sadlej, Spektroskopia molekularna, WNT, Warszawa 2002. W. Kołos, J. Sadlej, Atom i cząsteczka, WNT, Warszawa 2007. H. Haken, H.C. Wolf, Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej, PWN, Warszawa 1998. 										
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> Biofizyka. Wybrane zagadnienia wraz z ćwiczeniami, PWN, Warszawa 2008. Fotochemia i spektroskopia optyczna. Ćwiczenia laboratoryjne, PWN, Warszawa 2009. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wyd. Naukowe UMK, Toruń 2014. 										
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:										

<p>Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania</p>	<p>Prawa absorpcji Bougera-Lamberta i Lamberta-Beera, prawo addytywności absorpcji.</p> <p>Przybliżone zakresy energetyczne podstawowych metod spektroskopowych.</p> <p>Mechanizm Einsteina: absorpcja wymuszona, emisja wymuszona, emisja spontaniczna.</p> <p>Separacja elektronowego równania Schrödingera. Przybliżenie adiabatyczne i Borna-Oppenheimera. Separacja translacyjnych, rotacyjnych i oscylacyjnych stopni swobody.</p> <p>Model rotatora sztywnego. Poziomy energetyczne rotatora sztywnego, stała rotacyjna, term rotacyjny.</p> <p>Wpływ stanu oscylacyjnego cząsteczki na widma rotacyjne.</p> <p>Podstawowe informacje o widmach rotatorów wieloatomowych.</p> <p>Poziomy energetyczne kwantowego oscylatora harmonicznego, energia zerowa oscylacji.</p> <p>Energia oscylatora anharmonicznego, zmiana reguł wyboru. Anharmoniczność mechaniczna i elektryczna.</p> <p>Reguły wyboru w spektroskopii rotacyjno-oscylacyjnej.</p> <p>Pasma stokesowskie i antystokesowskie, intensywność pasm ramanowskich.</p> <p>Pomiary stopnia depolaryzacji i ich zastosowanie.</p> <p>Metodyka spektroskopii Ramana.</p> <p>Reguła Francka-Condon, przejścia elektronowe prostopadłe i adiabatyczne.</p> <p>Chromofory.</p> <p>Widma metali przejściowych, kompleksy wysoko- i niskospinowe.</p> <p>Widma emisyjne: fluorescencja, fosforescencja.</p> <p>Czynnik jądrowy i moment magnetyczny jądra.</p> <p>Przemiatanie polem i częstością w pomiarach NMR.</p> <p>Wektor magnetyzacji, relaksacja podłużna i poprzeczna.</p>
<p>Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu</p>	<p>Nie dotyczy</p>

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.