

SYLABUS PRZEDMIOTU – SZKOŁA DOKTORSKA
CYKL KSZTAŁCENIA 2024/25
i
CYKL KSZTAŁCENIA 2022/23

OGÓLNE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE				
Tytuł przedmiotu		Spektroskopia cząsteczek wieloatomowych		
Nazwa jednostki realizującej przedmiot		Szkoła Doktorska w Uniwersytecie Rzeszowskim		
Typ przedmiotu (obowiązkowy, fakultatywny)		Przedmiot obowiązkowy fakultatywny (specjalistyczny) do wyboru		
Rok/semestr		2024/2025; semestr II i semestr 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 z zakresu fizyki, fizyki kwantowej i spektroskopii molekularnej na poziomie studiów II stopnia na kierunku fizyka lub chemia.		
STRESZCZENIE PRZEDMIOTU (syntetyczny opis treści oraz celów przedmiotu; 100-200 słów)				
Kurs poświęcony jest zaawansowanym zagadnieniom spektroskopii cząsteczek wieloatomowych, ze szczególnym uwzględnieniem metod pozwalających na badanie ich struktury oraz dynamiki. Obejmuje zarówno aspekty teoretyczne, jak i praktyczne, w tym interpretację widm, zastosowanie teorii grup w analizie symetrii, a także nowoczesne techniki spektroskopowe. Kurs umożliwia zrozumienie zjawisk kwantowych zachodzących w cząsteczkach wieloatomowych oraz ich powiązań z wynikami eksperymentalnymi.				
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	zagadnienia spektroskopii cząsteczek wieloatomowych w stopniu umożliwiającym rewizję istniejących paradygmatów zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych.	P8S-WG/1	Konwersatorium	projekt
2	główne tendencje rozwojowe współczesnej spektroskopii cząsteczek wieloatomowych.	P8S-WG/2	Konwersatorium	projekt

3	posiada interdyscyplinarną wiedzę, zna i rozumie terminologię używaną w dyscyplinie nauki fizyczne w języku rodzimym i obcym, szczególnie w zagadnieniach odnoszących się do spektroskopii cząsteczek wieloatomowych.	P8S-WG/3	Konwersatorium	projekt
4	zna i rozumie wpływ rozwoju techniki i technologii na postęp cywilizacji, w tym na odkrywanie nowych zagadnień w spektroskopii cząsteczek wieloatomowych.	P8S-WK1		
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 cząsteczek wieloatomowych, 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	Konwersatorium	projekt
2	potrafi dobrać i wykorzystać dostępną literaturę fachową dotyczącą spektroskopii cząsteczek wieloatomowych do diagnozowania i rozwiązywania problemów badawczych oraz działań innowacyjnych powiązanych z prowadzoną działalnością naukową, a także zastosować właściwy tok postępowania do tworzenia nowych elementów dorobku naukowego.	P8S-UW/2	Konwersatorium	projekt
3	dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań spektroskopowych, działalności eksperckiej i innych prac o charakterze twórczym oraz ich wkładu w rozwój wiedzy.	P8S_UW3	Konwersatorium	projekt
4	posługiwać się językiem angielskim na poziomie B2 Europejskiego Systemu Kształcenia Językowego	P8S-UK/6	Konwersatorium	projekt

	w stopniu umożliwiającym uczestnictwo w międzynarodowym środowisku naukowym związanym ze spektroskopią cząsteczek wieloatomowych.			
Kompetencje społeczne Lp.	Jest gotów do			
1	uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych na przykładzie zagadnień spektroskopii molekularnej.	P8S-KK/3	Konwersatorium	projekt

FORMY ZAJĘĆ DYDAKTYCZNYCH, WYMIAR GODZIN I PUNKTÓW₁

Semestr (nr)	Wykł.	Ćwiczenia	Lab.	Prakt.	Inne	Liczba pkt. ECTS
II i IV	-	-	—	—	15	2

METODY DYDAKTYCZNE

- prezentacja;
- dyskusja;
- rozwiązywanie zadań obliczeniowych;
- rozwiązywanie problemów;

TREŚCI PROGRAMOWE

A. Problematyka wykładu (5 godzin)

Treści merytoryczne:

1. Wprowadzenie do spektroskopii molekuł wieloatomowych.
2. Symetria molekularna i jej wpływ na widma spektroskopowe.
3. Spektroskopia oscylacyjna: drgania normalne, intensywności przejść, reguły wyboru.
4. Spektroskopia rotacyjna molekuł wieloatomowych: struktura i analiza widm.
5. Dynamika wewnętrzna molekuł wieloatomowych i sprzężenia między oscylacjami a rotacjami.

B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych (10 godzin)

Treści merytoryczne:

Rozwiązywanie zadanych problemów za pomocą współczesnych metod obliczeniowych spektroskopii cząsteczek wieloatomowych. Zadania zostaną wybrane odpowiednio do tematyki wykładów.

1. Analiza symetrii molekuł i wykorzystanie teorii grup w spektroskopii.
2. Rozwiązywanie problemów z zakresu spektroskopii oscylacyjnej.
3. Interpretacja widm rotacyjnych i oscylacyjno-rotacyjnych przy użyciu dostępnych narzędzi obliczeniowych.
4. Modelowanie widm molekuł wieloatomowych z uwzględnieniem sprzężeń między ruchem oscylacyjnym a rotacyjnym.

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU (KRYTERIA OCENIANIA)

Przedmiot kończy się egzaminem po każdym semestrze realizacji (semestr 2, semestr IV, semestr VI, semestr VII). Możliwe oceny semestralne to: 2.0, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5, 5.0.

Końcowa ocena z ćwiczeń wystawiona zostanie na podstawie ocen cząstkowych:

- **bardzo dobry**: doktorant opanował ponad 90% zakresu wiedzy; umie rozwiązywać zadania rachunkowe;
- **dobry plus**: doktorant opanował ponad 80% zakresu wiedzy; umie rozwiązywać zadania rachunkowe;
- **dobry**: doktorant opanował ponad 80 % zakresu wiedzy i potrafi rozwiązywać typowe zadania rachunkowe;
- **dostateczny plus**: doktorant opanował ponad 70% zakresu wiedzy i potrafi rozwiązywać typowe zadania rachunkowe;

- dostateczny: doktorant zna podstawowe pojęcia dotyczące przedmiotu oraz potrafi rozwiązywać proste zadania rachunkowe; - niedostateczny: doktorant zna podstawowe pojęcia dotyczące przedmiotu, nie potrafi rozwiązywać prostych zadań rachunkowych;	
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 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.)	40
SUMA GODZIN	60
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS	2
LITERATURA	
Literatura podstawowa:	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> , (2 nd 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:	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.

1.10.2024 Rafał Hakalla

.....
Data i podpis prowadzącego przedmiot

.....
Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej