

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Fizyczne podstawy technik analitycznych (WTCNXCSM-FPTA)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Physical basics of analytical techniques

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Cykl dydaktyczny: Semestr letni 2024/2025

Koordynator przedmiotu cyklu: dr inż. Wiktor Piecek

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Zaliczenie na ocenę

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Wprowadzenie do fizyki współczesnej. Zarys modelu mechaniki kwantowej. Równanie Schrödingera w zastosowaniu do budowy atomu i molekuly (zarys) oraz do interpretacji zjawisk fizycznych oddziaływania promieniowania elektromagnetycznego z materią. Mikroskopia AFM, SEM i TEM. Zarys metod przybliżonych w chemii teoretycznej. Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej (absorpcja, emisja, rozpraszanie). Kwantowe generatory promieniowania. Metody rezonansowe w technikach analitycznych. Spektroskopia atomowa, molekularna (rotacyjna, oscylacyjna, ramanowska). Wprowadzenie do NMR i EPR.

Opis:

Wykład: Metody dydaktyczne: Wykład z elementami pokazu, wybrane elementy demonstrowane metodami obliczeń modelowania komputerowego. Ćwiczenia rachunkowe z wybranych elementów metod obliczeniowych. Ćwiczenia praktyczne z wykorzystaniem oprogramowania do modelowania kwantowo-mechanicznego. Prace semestralne.

Treści programowe:

1. Narodziny fizyki współczesnej i stara teoria kwantów. Zasada nieoznaczoności Heisenberga. 2godz.
2. Równanie Schrödingera i jego konsekwencje. 2godz.
3. Rachunek operatorowy w mechanice kwantowej. Reguła Jordana. 6 postulatów mechaniki kwantowej. 2godz.
4. Kluczowa rola modelu mechaniki kwantowej w interpretacji zjawisk w skali atomowej. Proste zastosowania mechaniki kwantowej do opisu układów modelowych (cząstka w pudle potencjału, oscylator harmoniczny, rotator sztywny, efekt tunelowy). 2godz.
5. Wprowadzenie do mikroskopii sił atomowych AFM, mikroskopii elektronowej SEM i TEM. 2godz.
6. Atom wodoropodobny. Model sztywnego rotatora. Spin elektronu. Metody przybliżone w chemii teoretycznej. Zarys metod wariacyjnych i metody zaburzeń. Atomy wieloelektronowe. Przybliżenie Borna-Oppenheimera i adiabatyczne a struktura molekuł. Minimalny model molekuly. Podstawowe interpretacje metod spektroskopii modelem mechaniki kwantowej. Szerokość linii widmowych. 2godz.
7. Spektroskopia atomowa: reguły wyboru, struktura subtelna i sprzężenie spin-orbita, precesja. 2godz.
8. Spektroskopia molekularna: wprowadzenie do spektroskopii elektronowo-oscylicyjno-rotacyjnej. 2godz.
9. Spektroskopia rotacyjna, model rotatora sztywnego i elastycznego, reguły wyboru, przykłady. 2godz.
10. Rotacyjna spektroskopia ramanowska, przypadki różnych typów molekuł. Efekt Starka. 2godz.
11. Spektroskopia oscylacyjna: struktura widma, reguły wyboru, potencjał Morse'a. 2godz.
12. Metody rezonansowe w technikach analitycznych. Fizyczne podstawy spektroskopii EPR, NMR. 4. godz.

Cele:

Nauczyć: interpretacji obserwowanych zjawisk metodami chemii kwantowej oraz mechaniki i dynamiki molekularnej; wykorzystania podstaw fizycznych i modelu mechaniki kwantowej w zagadnieniach spektroskopii, opisie budowy materii i jej oddziaływania z promieniowaniem elektromagnetycznym. Zapoznać z: podstawami fizycznymi technik rezonansowych w metodach analitycznych, zasadami funkcjonowania kwantowych generatorów promieniowania.

Ćwiczenia: Pokazać i przeciwżyć model i metody mechaniki kwantowej w działaniu.

Laboratoria: Zapoznać studentów z podstawami obliczeń kwantowomolekularnych z wykorzystaniem oprogramowania komercyjnego.

Literatura:

Literatura podstawowa:

1. H. Haken, H. Ch. Wolf, „Atom i cząsteczka”, PWN 1998 ,
2. H. Haken, H. Ch. Wolf, „Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej”, PWN 1998,
3. L. Piela, „Idee Chemii Kwantowej”, PWN, 2005,
4. "Spektroskopia oscylacyjna". Od teorii do praktyki" pod red. Kamili Małek, PWN 2016 - BG WAT - biblioteka IBUK
5. E. Szpolski. Fizyka atomowa, dowolne wydanie,

Efekty uczenia się:

W1. Zna prawa i teorie z zakresu chemii, fizyki, matematyki w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii. Ma opanowaną wiedzę w zakresie teorii wiązań chemicznych, teoretycznych podstaw spektroskopii molekularnej. Jest zapoznany z podstawami technik obliczeniowych chemii teoretycznej oraz zastosowaniami mechaniki kwantowej w inżynierii materiałowej. K_W04

W2. Zna zasady metod spektroskopowych. Posiada wiedzę o metodach badania własności cieplnych, optycznych, elektrycznych i magnetycznych. Zapoznany jest z technikami komputerowymi w badaniach struktury i właściwości materiałów. K_W06

W3. Zna zasady metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu fizyki współczesnej powiązaniu z zagadnieniami chemii teoretycznej; identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę. Zna zasady projektowania struktury materiałów inżynierskich z uwzględnieniem wymaganych właściwości fizyko-chemicznych i eksploatacyjnych. K_W09

U1. Umie symulować właściwości molekuł w powiązaniu z zagadnieniami spektroskopii. Potrafi integrować uzyskane informacje z danymi pomiarowymi. /K_U03

U2. Potrafi planować i przeprowadzać symulacje komputerowe prostych struktur molekularnych, uzyskać dane spektroskopowe i interpretować uzyskane wyniki. /K_U07

K1. Potrafi planować eksperyment i symulacje komputerowe w zakresie badań materiałowych metodami spektroskopowymi i rezonansowymi. /K_K04

Metody i kryteria oceniania:

Laboratorium – zaliczenie ćwiczenia wymaga uzyskania pozytywnej oceny ze sprawdzianu przed rozpoczęciem ćwiczenia, wykonania ćwiczenia i oddania pisemnego sprawozdania z ćwiczenia. Warunkiem zaliczenia przedmiotu jest uzyskanie pozytywnych ocen z ćwiczeń laboratoryjnych i rachunkowych oraz z pisemnego egzaminu zawierającego pytania otwarte oraz testowe wielokrotnego wyboru. Osiągnięcie efektów W1, W2, W3, U1, U2, i K1 weryfikowane jest podczas egzaminu, natomiast efekty W1, W3, U3 i K1 sprawdzane są w trakcie realizacji ćwiczeń laboratoryjnych. Wszystkie sprawdziany i kolokwia są oceniane wg następujących zasad: ocena 2 – poniżej 60%, ocena 3 – $61 \div 66\%$, ocena 3,5 – $67 \div 73\%$, ocena 4 – $74 \div 80\%$, ocena 4,5 – $81 \div 88\%$, ocena 5 – powyżej 89% poprawnych odpowiedzi. Ocenę bardzo dobrą otrzymuje student, który posiadał wiedzę, umiejętności i kompetencje przewidziane efektami kształcenia, zna i rozumie przedstawione pojęcia i prawa a także rozumie ich kontekst oraz umie je samodzielnie interpretować, dostrzega związki pomiędzy nimi, a ponadto wykazuje zainteresowanie przedmiotem, w sposób twórczy podchodzi do powierzonych zadań i wykazuje się samodzielnością w zdobywaniu wiedzy, jest wytrwały w pokonywaniu trudności oraz systematyczny w pracy. Ocenę dobrą otrzymuje student, który posiadał wiedzę i umiejętności przewidziane programem nauczania; zna i rozumie przedstawione pojęcia i prawa oraz umie je interpretować. Potrafi rozwiązywać zadania i problemy o średnim stopniu trudności. Ocenę dostateczną otrzymuje student, który posiadał wiedzę i umiejętności przewidziane programem nauczania; zna i rozumie przedstawione pojęcia i prawa w podstawowym zakresie. Samodzielnie rozwiązuje zadania i problemy o niskim stopniu trudności. W jego wiedzy i umiejętnościach zauważalne są luki, które potrafi jednak uzupełnić samodzielnie lub pod kierunkiem nauczyciela. Na końcową ocenę składają się: ocena uzyskana na egzaminie, oceny z ćwiczeń laboratoryjnych oraz ocena systematyczności w zdobywaniu wiedzy i jej trwałość.
Praktyki zawodowe:
nie dotyczy
Forma studiów
stacjonarne
Rodzaj studiów
II stopnia
Rodzaj przedmiotu
obowiązkowy
Przedmioty wprowadzające
Fizyka - wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć i praw fizycznych związanych z budową materii. Matematyka - wymagania wstępne: znajomość rachunku różniczkowego i całkowego. Podstawy fizyki ciała stałego - wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć i praw fizyki ciała stałego.
Programy
Inżynieria Materiałowa
Forma zajęć liczba godzin/rygor
W 26/+ C 12/+ L 8/+
Autor
dr hab, inż. Wiktor Piecek
Bilans ECTS
1. Udział w wykładach 26 2. Udział w laboratoriach 8 3. Udział w ćwiczeniach 12 4. Udział w seminariach 5. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów 16 6. Samodzielne przygotowanie do laboratoriów 8 7. Samodzielne przygotowanie do ćwiczeń 10 8. Samodzielne przygotowanie do seminarium 9. Realizacja projektu 10. Udział w konsultacjach 11. Przygotowanie do egzaminu 12. Przygotowanie do zaliczenia 16 13. Udział w egzaminie godz.; ECTS Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 96; 3,0 Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1+2+3+4+9+10+13: 46; 2,0 Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 46; 2,0

Dane dotyczące przedmiotu cyklu:

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:
Zaliczenie na ocenę