

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.06 Спектроскопия атомов и молекул

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

03.03.02 ФИЗИКА

Направленность (профиль)

03.03.02.01 Фундаментальная физика

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

д-р физ.-мат. наук, профессор, Слюсарева Е.А.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Цель преподавания дисциплины – освоение и систематизация знаний по электронной спектроскопии атомных и молекулярных систем, формирование гармоничного (комплексного) представления о современных теоретических и экспериментальных методах исследования в этой области науки и ее различных практических приложениях

1.2 Задачи изучения дисциплины

В результате изучения дисциплины студент должен приобрести знания, умения и навыки, необходимые для его профессиональной деятельности, в частности:

- сформировать представления об особенностях электронных спектров сложных молекул как качественного перехода от спектров атомов к спектрам простых молекул, от спектров простых молекул к спектрам сложных молекул;
- изучить теоретические концепции и модели современной оптической спектроскопии, описывающие взаимодействие света с веществом в явлениях поглощения и флуоресценции;
- развить способности использования средств и методов оптической спектроскопии как в научной, так и практической деятельности.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ПК-3: готовностью применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований	
ПК-3: готовностью применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований	Знает основные теоретические предпосылки формирования энергетической структуры люминофоров, спектральные характеристики изолированных и взаимодействующих со средой люминофоров Знает экспериментальные методы, используемые в электронной спектроскопии молекулярных систем, принцип работы спектральных приборов Знает совокупность факторов, влияющих на точность экспериментальных результатов Классифицирует спектры (электронные, колебательные, вращательные), делает оценки для нахождения эффективности воздействия излучения на молекулы Извлекает информации об энергетической структуре молекул на основе их электронных спектров Ориентируется в современной научной литературе, правильно описывает и излагает результаты исследований

	Описывает воздействие электромагнитного излучения на молекулы Пользуется терминологией, принятой в области спектроскопии Использует современные методы электронной спектроскопии для решения широкого круга задач
--	---

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	
занятия лекционного типа	1 (36)	
практические занятия	1 (36)	
Самостоятельная работа обучающихся:	2 (72)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. Спектроскопия атомов									
	1. Предмет атомной спектроскопии. Основные понятия физические величины, используемые в спектроскопии. Методы атомной спектроскопии, их информативность и практическая значимость	2							
	2. Спонтанные и вынужденные переходы. Коэффициенты Эйнштейна. Время жизни в возбужденном состоянии. Сила перехода. Сила осциллятора.	2							
	3. Спин-орбитальное взаимодействие	2							
	4. Атом водорода: классическая и квантовая теория	2							
	5. Систематика состояний электронов в многоэлектронных атомах. Центральное-симметричное поле. Систематика состояний	2							

6. Электростатическое и спин-орбитальное расщепление уровней в приближении L-S связи. Тонкая структура термов. Систематика состояний электронов в случае j-j связи. Правила отбора для излучательных переходов.	2							
7. Спектры щелочных металлов. Сериальные закономерности. Тонкая структура. Спектры Cu, Au, Ag. Спектры щелочно-земельных элементов. Спектры Zn, Cd, Hg. Смещенные термы. Автоионизация	2							
8. Спектры атомов с заполняющимися p-, d- и f-оболочками.	2							
9. Основные константы и физические величины, используемые в спектроскопии и связь между ними			2					
10. Расчет констант скоростей спонтанных и вынужденных переходов			2					
11. Спин-орбитальное расщепление в магнитном поле (эффект Зеемана)			2					
12. Расчет энергетической структуры атома водорода			2					
13. Четность состояний, правила отбора по четности			2					
14. Нахождение термов многоэлектронных конфигураций в приближении L-S и j-j связи			2					
15. Спектральные закономерности щелочных металлов, дублетное расщепление			2					
16. Расчет термов многоэлектронных конфигураций атомов с заполняющимися p, d и f – оболочками.			2					
17. Промежуточная аттестация (выполнение теста по 1 разделу)			2					
18.							24	

2. Спектроскопия изолированных молекул								
1. Предмет молекулярной спектроскопии. Методы молекулярной спектроскопии, их информативность и практическая значимость. Спектроскопия свободных молекул. Описание движения свободных молекул. Выбор системы координат. Гамильтониан молекулы. Разделение движений молекулы на электронное, колебательное, вращательное.	2							
2. Колебательная спектроскопия двухатомных молекул. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Модель колеблющегося ротатора.	2							
3. Электронные состояния и химическая связь двухатомных молекул. Молекулярные орбитали. Приближение ЛКАО. Классификация электронных состояний.	2							
4. Электронные спектры двухатомных молекул. Правила отбора. Прогрессии. Секвенции. Таблица Деландра. Вращательная структура электронно-колебательных переходов. Диаграмма Фортра. Образование кантов. Принцип Франка-Кондона. Распределение интенсивности в спектрах электронно-колебательных переходов. Взаимодействие электронного и вращательного движений.	2							
5. Равновесная конфигурация молекулы и ее свойства симметрии. Форма и размеры молекулы. Понятие точечных групп симметрии	2							
6. Модель сферического, симметричного, асимметричного волчков многоатомной молекулы. Информативность вращательных спектров	2							

7. Выбор колебательных координат. Нормальные колебания многоатомной молекулы. Квантово-механическое решение задачи о нормальных колебаниях. Ангармонизм. Симметрия колебательных состояний. Правила отбора по симметрии. Информативность колебательных спектров.	2							
8. Вибронные состояния. Взаимодействия электронного движения с колебательным. Интенсивность электронных переходов и правила отбора. Связь между химическим строением и электронными спектрами. Принцип Франка-Кондона для многоатомных молекул	2							
9. Классификация молекул на простые, полусложные, сложные. Образование электронных полос поглощения и испускания сложных молекул. Диаграмма Яблонского	2							
10. Вращательная и колебательная структура спектров двухатомных молекул			2					
11. Построение молекулярных орбиталей методом ЛКАО.			2					
12. Заполнение таблицы Деландра, построение диаграммы Фортра.			4					
13. Принадлежность молекул к группам симметрии, определение типов колебаний			2					
14. Расчет параметров асимметрии волчков			2					
15. Промежуточная аттестация (выполнение теста по 2 разделу)			2					
16. Выступление с рефератами на тему «Экспериментальные методы спектроскопии»			2					

17. Выступление с рефератами на тему «Экспериментальные методы спектроскопии»			2					
18.							24	
3. Спектроскопия связанных молекул								
1. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Универсальные взаимодействия. Специфические взаимодействия.	2							
2.							24	
Всего	36		36				72	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Флайгер У. Х., Ельяшевич М. А. Структура и динамика молекул: Том 1: в 2-х томах : перевод с английского(Москва: Мир).
2. Флайгер У. Х., Ельяшевич М. А. Структура и динамика молекул: Том 2: в 2-х томах : перевод с английского(Москва: Мир).
3. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 2. Атомная спектроскопия: в 3-х ч.(Москва: URSS).
4. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 3. Молекулярная спектроскопия: в 3-х ч.(Москва: URSS).
5. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 1. Общие вопросы спектроскопии: [в 3-х ч.](Москва: URSS).
6. Демтрёдер В., Мельников Л. А. Современная лазерная спектроскопия: [учебное пособие](Долгопрудный: Интеллект).
7. Лакович Д. Р., Кузьмин М. Г. Основы флуоресцентной спектроскопии: перевод с английского(Москва: Мир).
8. Владимиров Ю. А., Потапенко А. Я. Физико-химические основы фотобиологических процессов: учебник для студентов по специальностям 040100- Лечебное дело, 04020- Педиатрия, 040800- Медицинская биохимия, 040900- Медицинская биофизика, 0401000- Медицинская кибернетика(Москва: Дрофа).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Microsoft Office,
2. Специализированные программы UVVINLAB, DAS6 для получения и обработки спектральных и хроноскопических данных по поглощению и флуоресценции

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Используются следующие российские и международные базы данных научных публикаций:
2. www.isiknowledge.com,
3. <http://elibrary.ru>,
4. базы данных спектральных характеристик органических веществ:
5. <http://omlc.org>.

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лекционные и практические занятия проводятся в учебных аудиториях, укомплектованных специализированной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.