

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

Б1.В.04 Спектроскопия атомов и молекул

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

03.03.02 Физика

Направленность (профиль)

03.03.02.32 Фундаментальная физика

Форма обучения

очная

Год набора

2021

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
<b>ПК-1: Способен использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования, информационные ресурсы в своей предметной области физики и техники</b>	
ПК-1.1: Понимает цели и задачи проводимых физических исследований и технических разработок	Знает основные теоретические предпосылки формирования энергетической структуры молекул Знает спектральные характеристики изолированных и взаимодействующих со средой молекул Знает экспериментальные методы, используемые в электронной спектроскопии молекулярных систем.
ПК-1.2: Собирает, обрабатывает, анализирует и обобщает передовой отечественный и международный опыт в соответствующей области физических и технических исследований	Проводит анализ отечественного и зарубежного опыта по спектроскопии атомов и молекул Классифицирует спектры (электронные, колебательные, вращательные) и делает оценки эффективности воздействия излучения на молекулы Извлекает информацию об энергетической структуре молекул на основе их оптических спектров.
ПК-1.3: Использует методы анализа научно-технической информации	Использует терминологией, принятой в области спектроскопии Излагает результаты исследований Работает с техническими текстами

#### **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
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>2 (72)</b>	
занятия лекционного типа	1 (36)	
практические занятия	1 (36)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>1 (36)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	
<b>Промежуточная аттестация (Экзамен)</b>	<b>1 (36)</b>	

### 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
<b>1. Спектроскопия атомов</b>									
	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.							9	

<b>2. Спектроскопия изолированных молекул</b>								
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.							9	
<b>3. Спектроскопия связанных молекул</b>								
1. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Универсальные взаимодействия. Специфические взаимодействия.	2							
2.							18	
Всего	36		36				36	

## **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](http://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.