

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

Б1.В.02 Спектроскопия атомов и молекул

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Направленность (профиль)

03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения

очная

Год набора

2023

Красноярск 2023

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-1: Способен применять знания в области фундаментальной и прикладной физики в научно-исследовательских и прикладных работах	
ПК-1.1: Планирует, организывает и проводит научные и прикладные исследования, используя знания в области фундаментальной и прикладной физики	основные теоретические предпосылки формирования энергетической структуры атомов и молекул спектральные характеристики изолированных и взаимодействующих со средой молекул экспериментальные методы, используемые в электронной спектроскопии молекулярных систем. классифицировать спектры (электронные, колебательные, вращательные) делать оценки на основе принятых моделей (водородоподобный атом, ротатор, осциллятор и др) методами описания воздействия электромагнитного излучения на атомы и молекулы терминологией, принятой в области спектроскопии

ПК-1.2: Анализирует отечественные и зарубежные достижения в области фундаментальной и прикладной физики для	основные стандартные программных средства для поиска научной литературы по заданным критериям подготовка презентации проводить анализ отечественного и зарубежного опыта по спектроскопии атомов и молекул
осуществления выбора форм и методов научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем научного исследования	классифицировать спектры (электронные, колебательные, вращательные) и делать оценки эффективности воздействия излучения на молекулы извлекать информацию об энергетической структуре молекул на основе их оптических спектров. навыками поиска необходимой научной информации из оригинальных источников навыками организации самостоятельной работы навыками правильно описывать и излагать результаты исследований в реферативной форме
ПК-2: Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях	
ПК-2.1: Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	принцип работы спектральных приборов совокупность факторов, влияющих на точность экспериментальных результатов методы получения спектров поглощения и испускания извлекать необходимую для спектральных измерений информацию на основе руководства пользователя современных спектральных приборов методами обработки первичных данных навыками сопоставления экспериментальных данных базовым физическим моделям
ПК-2.2: Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	основные характеристики инструментальных средств (спектральных приборов), необходимых для решения научной задачи определять необходимый набор экспериментальных методик для решения определенной научно-исследовательской задачи Навыками поиска информационных ресурсов для определения инструментальных решений в области воздействия электромагнитного излучения на вещество

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:	1 (36)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	
Промежуточная аттестация (Экзамен)	1 (36)	

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.							9	

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.							9	
3. Спектроскопия связанных молекул								
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. Строение и динамика молекул: Том 1: в 2-х томах : перевод с английского(Москва: Мир).
2. Флайгер У. Х., Ельяшевич М. А. Строение 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.