

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Атомная и молекулярная спектроскопия Б1.В.ДВ.9

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Камалова Д.И.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Салахов М. Х.

Протокол заседания кафедры No _____ от "_____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No _____ от "_____" _____ 201__ г

Регистрационный No 638217

Казань

2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Камалова Д.И.
Кафедра оптики и нанофотоники Отделение физики, Dina.Kamalova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Ознакомление с принципами атомной и молекулярной спектроскопии, с систематикой атомных и молекулярных спектров, изучение электронных состояний и химической связи в двухатомных и многоатомных молекулах, учет свойств симметрии равновесной конфигурации молекул при классификации колебаний по их симметрии, а также использование характеристичности колебаний для идентификации соединений.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.9 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.03.02 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7, 8 семестры.

Дисциплина "Атомная и молекулярная спектроскопия" относится к дисциплинам по выбору профессионального цикла: Б.3.ДВ.7. Для освоения данной дисциплины требуются знания обучающегося, приобретенные при изучении общего курса физики, в частности, разделов Оптика, Атомная физика.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|--|--|
| ПК-1 (профессиональные компетенции) | способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин |
| ПК-2 (профессиональные компетенции) | способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта |
| ПК-4 (профессиональные компетенции) | способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин |

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

природу атомных и молекулярных спектров; обладать теоретическими знаниями об энергетических состояниях атомов, молекул и переходах между ними;

2. должен уметь:

анализировать атомные спектры элементов Периодической системы Д.И. Менделеева; определять строение и параметры простых молекул из спектроскопических данных.

3. должен владеть:

практическими навыками в области атомной и молекулярной спектроскопии, методами решения расчетных задач, связанных с изучением строения молекул и их электронных, колебательных и вращательных спектров, интерпретацией экспериментальных данных в оптической атомной и молекулярной спектроскопии

4. должен демонстрировать способность и готовность:

интерпретировать атомные и молекулярные спектры, применять знания в аналитических целях и научной работе, экспериментально получать и анализировать атомные и молекулярные спектры

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных(ые) единиц(ы) 288 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины отсутствует в 7 семестре; экзамен в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 1. | Тема 1. Спектр атома водорода и водородоподобных атомов. | 7 | 1 | 2 | 0 | 6 | Устный опрос |
| 2. | Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов. | 7 | 2 | 2 | 0 | 6 | Устный опрос |
| 3. | Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний. | 7 | 3,4 | 4 | 0 | 8 | Устный опрос |
| 4. | Тема 4. Сложение орбитальных и спиновых моментов. | 7 | 5 | 2 | 0 | 0 | |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|-----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 5. | Тема 5. Спектры элементов с оболочками p, p2, p3, p4, p5, p6 (инертные газы). Спектры элементов с достраиваемыми d- и f-оболочками. | 7 | 6-7 | 4 | 0 | 0 | |
| 6. | Тема 6. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями. Дипольное излучение. Сила осциллятора. | 7 | 8 | 2 | 0 | 0 | |
| 7. | Тема 7. Ширина уровней энергии и спектральных линий. | 7 | 9 | 2 | 0 | 0 | |
| 8. | Тема 8. Молекула как система взаимодействующих частиц. Разделение энергии молекулы на составляющие. | 7 | 10 | 2 | 0 | 0 | |
| 9. | Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор. | 7 | 11 | 2 | 0 | 0 | Контрольная работа |
| 10. | Тема 10. Молекула как гармонический осциллятор. | 7 | 12 | 2 | 0 | 0 | |
| 11. | Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор. | 7 | 13 | 4 | 0 | 0 | Тестирование |
| 12. | Тема 12. Спектры комбинационного рассеяния света. | 7 | 14 | 2 | 0 | 0 | |
| 13. | Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор. | 7 | 15 | 2 | 0 | 8 | Контрольная работа |
| 14. | Тема 14. Распределение интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах. | 7 | 16 | 2 | 0 | 0 | |
| 15. | Тема 15. Колебательная структура электронных полос. | 7 | 17 | 2 | 0 | 8 | Устный опрос |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|-----|--|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|-----------------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 16. | Тема 16. Вращательная структура электронных полос. | 8 | 18 | 2 | 0 | 0 | |
| 17. | Тема 17. Классификация электронных состояний молекулы. Связи Гунда. | 8 | 18 | 2 | 0 | 0 | |
| 18. | Тема 18. Свойства симметрии собственных функций молекул. | 8 | 19 | 2 | 0 | 0 | |
| 19. | Тема 19. Принципы построения электронных конфигураций. | 8 | 20 | 2 | 0 | 0 | |
| 20. | Тема 20. Электронные состояния и химическая связь в молекулах. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. | 8 | 21 | 4 | 0 | 0 | |
| 21. | Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным. | 8 | 22,23 | 2 | 0 | 0 | Письменное домашнее задание |
| 22. | Тема 22. Многоатомные молекулы. Элементы симметрии и точечные группы симметрии молекул. | 8 | 24,25 | 4 | 0 | 0 | |
| 23. | Тема 23. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул. | 8 | 26 | 2 | 0 | 0 | |
| 24. | Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул. | 8 | 26,27 | 4 | 0 | 0 | Тестирование |
| 25. | Тема 25. Колебательная задача для молекул при учете свойств симметрии. | 8 | 28 | 2 | 0 | 0 | |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|-----|--|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 26. | Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул. | 8 | 29,30 | 4 | 0 | 10 | Устный опрос |
| 27. | Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул. | 8 | 31,32 | 2 | 0 | 8 | Устный опрос |
| 28. | Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул. | 8 | 33,34 | 2 | 0 | 18 | Устный опрос |
| 29. | Тема 29. Спектры люминесценции. | 8 | 35 | 2 | 0 | 0 | |
| | Тема . Итоговая форма контроля | 8 | | 0 | 0 | 0 | Экзамен |
| | Итого | | | 72 | 0 | 72 | |

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Спектр атома водорода и водородоподобных атомов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Спектр водорода. Уровни энергии атома. Спектральные термы. Диаграмма Гротриана. Сериальные закономерности. Правила отбора. Сери Лаймана, Бальмера, Пашена. Тонкая структура спектра водорода. Лэмбовский сдвиг.

лабораторная работа (6 часа(ов)):

Изучение спектра атома водорода и определение изотопического сдвига линий излучения.

Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек. Свойства элементов с заполненными и незаполненными оболочками.

лабораторная работа (6 часа(ов)):

Визуализация спектральных линий излучения атомов ртути, натрия, кадмия и неона и их соответствие диаграммам уровней энергии Гротриана.

Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Периодичность свойств элементов. Спектры щелочных металлов и сходных с ними ионов. Спектры Ag, Cu, Au. Спектры щелочноземельных элементов. Спектры Zn, Cd, Hg.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Качественный спектральный анализ смесей солей металлов на основе оптических спектров атомов.

Тема 4. Сложение орбитальных и спиновых моментов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Типы связи. Состояния эквивалентных электронов: 2 электрона, 3 электрона. Нормальное состояние атомов. Мультиплеты в спектрах.

Тема 5. Спектры элементов с оболочками p, p₂, p₃, p₄, p₅, p₆ (инертные газы). Спектры элементов с достраивающимися d- и f-оболочками.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Строение электронных оболочек Спектры элементов с одним и двумя p-электронами. Спектры элементов с тремя и большим числом p-электронов. Спектры атомов с замкнутой электронной оболочкой. Спектры атомов с достраивающейся d-оболочкой. Спектры элементов группы железа. Спектры элементов с достраивающейся f-оболочкой.

Тема 6. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями. Дипольное излучение. Сила осциллятора.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Описание излучения и поглощения света атомами с помощью вероятностей переходов. Интенсивность спектральных линий. Понятие силы осциллятора.

Тема 7. Ширина уровней энергии и спектральных линий.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Естественная ширина спектральных линий. Доплеровская ширина спектральных линий. Типы описания контура спектральной линии.

Тема 8. Молекула как система взаимодействующих частиц. Разделение энергии молекулы на составляющие.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Квантовомеханическая модель молекулы. Уравнение Шредингера для молекулы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Разделение энергии молекулы на составляющие. Основные типы молекулярных спектров.

Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Модель жесткого ротатора. Решение уравнения Шредингера для жесткого ротатора. Уровни энергии и спектр жесткого ротатора. Нежесткий ротатор.

Тема 10. Молекула как гармонический осциллятор.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Гармонические колебания двухатомной молекулы. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Уровни энергии и спектр гармонического осциллятора. Сравнение теоретических и экспериментальных спектров жесткого ротатора и гармонического осциллятора.

Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Кривая потенциальной энергии реальной молекулы. Собственные функции и правила отбора для ангармонического осциллятора. Сплошной спектр термов и диссоциация молекул. Функция Морзе.

Тема 12. Спектры комбинационного рассеяния света.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Комбинационное рассеяние света. Колебательный и вращательный спектры КР. Интенсивности линий в КР-спектре.

Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Колебательно-вращательные спектры двухатомной молекулы. R- и P-ветви вращательной структуры колебательного спектра. Изотопический эффект в спектрах двухатомных молекул.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Определение вращательных постоянных и межатомных расстояний двухатомных молекул по ИК-Фурье спектрам поглощения.

Тема 14. Распределение интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Зависимость интенсивности спектральных линий от распределения молекул по энергетическим состояниям. Сумма по состояниям. Относительная заселенность колебательных уровней энергии. Относительная заселенность вращательных уровней энергии.

Тема 15. Колебательная структура электронных полос.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электронные переходы двухатомных молекул. Колебательная структура электронных полос. Серии Деландра. Распределение интенсивности в электронно-колебательных спектрах. Принцип Франка-Кондона.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Определение молекулярных постоянных по электронным спектрам поглощения молекул.

Тема 16. Вращательная структура электронных полос.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Вращательная структура электронного перехода. Образование канта. Оттенение полос. Диаграмма Фортра. Комбинационные соотношения. Определение вращательных постоянных.

Тема 17. Классификация электронных состояний молекулы. Связи Гунда.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Полный момент количества движения электронов. Проекция полного орбитального момента по оси двухатомной молекулы. Мультиплетность состояний. Классификация электронных состояний молекулы. Взаимодействие вращательного движения с электронным движением. Связи Гунда.

Тема 18. Свойства симметрии собственных функций молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Свойства симметрии электронной собственной функции. Симметрия вращательных собственных функций. Положительные и отрицательные вращательные уровни. Симметричные и антисимметричные вращательные уровни для молекул, имеющих одинаковые ядра. Симметрия вращательных уровней с учетом электронных собственных функций. Типы электронных переходов.

Тема 19. Принципы построения электронных конфигураций.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение электронных состояний из разъединенных атомов. Определение молекулярных термов из состояний объединенного атома. Определение многообразия термов по электронной конфигурации.

Тема 20. Электронные состояния и химическая связь в молекулах. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Виды химической связи в молекулах. Два подхода к вопросу о химической связи и два основных приближенных метода расчёта химических связей: метод валентных связей и метод молекулярных орбиталей.

Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Связь термодинамических функций со спектроскопическими характеристиками двухатомной молекулы. Статистическая сумма по состояниям.

Тема 22. Многоатомные молекулы. Элементы симметрии и точечные группы симметрии молекул.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Форма и размеры многоатомных молекул. Симметрия молекул и основы теории групп. Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Общие выводы о симметрии молекулы.

Тема 23. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Вращение многоатомных молекул. Вращательные спектры линейных молекул. Молекулы типа сферического волчка. Молекулы типа симметричного и асимметричного волчка. Эффект Штарка.

Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Нормальные колебания многоатомных молекул. Классификация нормальных колебаний многоатомных молекул по их форме. Классическое решение задачи о малых колебаниях многоатомных молекул. Квантовомеханическое решение колебательной задачи.

Тема 25. Колебательная задача для молекул при учете свойств симметрии.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Общие принципы классификации колебаний по их симметрии. Координаты симметрии. Решение задачи о колебаниях молекул при учете свойств симметрии.

Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Понятие о характеристичности частот колебаний молекулярных фрагментов. Характеристические частоты ИК-поглощения основных классов соединений. Структурный молекулярный анализ по инфракрасному спектру поглощения.

лабораторная работа (10 часа(ов)):

Идентификация органических соединений по ИК-Фурье спектрам.

Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электронные состояния и химическая связь в многоатомных молекулах. Валентность атома. sp-, sp², sp³-гибридизация орбиталей.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Спектрофотометрический метод определения состава комплексных соединений в растворах по электронным спектрам поглощения многоатомных молекул

Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Классификация электронных переходов. Типичные хромофоры. Применение электронных спектров поглощения.

лабораторная работа (18 часа(ов)):

Количественный анализ двухкомпонентной системы по электронным спектрам поглощения

Тема 29. Спектры люминесценции.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Классификация различных видов люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Спектральные закономерности молекулярной люминесценции. Кинетика люминесценции.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|--|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 1. | Тема 1. Спектр атома водорода и водородоподобных атомов. | 7 | 1 | подготовка к устному опросу | 6 | устный опрос |

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|-----|---|---------|-----------------|---|------------------------|---------------------------------------|
| 2. | Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов. | 7 | 2 | подготовка к устному опросу | 6 | устный опрос |
| 3. | Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний. | 7 | 3,4 | подготовка к устному опросу | 4 | устный опрос |
| 9. | Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор. | 7 | 11 | Решение задач, подготовка к контрольной работе | 2 | контрольная работа |
| 11. | Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор. | 7 | 13 | подготовка к тестированию | 4 | тестирование |
| 13. | Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор. | 7 | 15 | Выполнение практических заданий подготовка к тестированию | 6 | контрольная работа |
| 15. | Тема 15. Колебательная структура электронных полос. | 7 | 17 | подготовка к устному опросу | 8 | устный опрос |
| 21. | Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным. | 8 | 22,23 | подготовка домашнего задания | 8 | домашнее задание |
| 24. | Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул. | 8 | 26,27 | подготовка к тестированию | 8 | тестирование |
| 26. | Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул. | 8 | 29,30 | подготовка к устному опросу | 8 | устный опрос |
| 27. | Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул. | 8 | 31,32 | подготовка к устному опросу | 6 | устный опрос |
| 28. | Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул. | 8 | 33,34 | подготовка к устному опросу | 6 | устный опрос |
| | Итого | | | | 72 | |

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Качество обучения достигается за счет использования следующих форм учебной работы: лекции, лабораторные работы, самостоятельная работа студентов, консультации.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Спектр атома водорода и водородоподобных атомов.

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы: Квантовые числа одноэлектронного атома. Уровни энергии атома водорода. Спектральные серии Бальмера, Лаймана, Бреккета, Пашена. Тонкая структура уровней энергии и спектральных линий атома водорода. Изотопический сдвиг.

Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов.

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы: Квантовые числа, характеризующие состояние сложного атома. Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек. Свойства элементов с заполненными и незаполненными оболочками.

Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний.

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы: Порядок заполнения электронных оболочек атомов. Периодичность свойств элементов. Спектральные серии атомов щелочных металлов. Дублетная структура уровней атомов щелочных металлов. Общая характеристика спектров атомов с двумя внешними электронами. Спектр атома гелия. Спектры щелочноземельных элементов.

Тема 4. Сложение орбитальных и спиновых моментов.

Тема 5. Спектры элементов с оболочками p , p_2 , p_3 , p_4 , p_5 , p_6 (инертные газы). Спектры элементов с достраивающимися d - и f -оболочками.

Тема 6. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями. Дипольное излучение. Сила осциллятора.

Тема 7. Ширина уровней энергии и спектральных линий.

Тема 8. Молекула как система взаимодействующих частиц. Разделение энергии молекулы на составляющие.

Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор.

контрольная работа , примерные вопросы:

Решение задач на вращательные спектры конкретных двухатомных молекул. Задачи прилагаются к программе.

Тема 10. Молекула как гармонический осциллятор.

Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор.

тестирование , примерные вопросы:

Тесты прилагаются к программе.

Тема 12. Спектры комбинационного рассеяния света.

Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор.

контрольная работа , примерные вопросы:

Решение задач на колебательные спектры конкретных двухатомных молекул. Задачи прилагаются к программе.

Тема 14. Распределение интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах.

Тема 15. Колебательная структура электронных полос.

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы: Электронно-колебательные спектры двухатомных молекул. Продольные и поперечные серии Деландра. Принцип Франка-Кондона.

Тема 16. Вращательная структура электронных полос.

Тема 17. Классификация электронных состояний молекулы. Связи Гунда.

Тема 18. Свойства симметрии собственных функций молекул.

Тема 19. Принципы построения электронных конфигураций.

Тема 20. Электронные состояния и химическая связь в молекулах. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей.

Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным.

домашнее задание , примерные вопросы:

Вычисление колебательных и вращательных сумм по состояниям двухатомных молекул.

Тема 22. Многоатомные молекулы. Элементы симметрии и точечные группы симметрии молекул.

Тема 23. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.

Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул.

тестирование , примерные вопросы:

Тесты прилагаются к программе.

Тема 25. Колебательная задача для молекул при учете свойств симметрии.

Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Правила отбора в колебательных спектрах многоатомных молекул. Характеристичность частот колебаний. Идентификация органических соединений с помощью групповых частот по инфракрасным спектрам поглощения. Какие колебания молекулы называются нормальными. Какие колебания молекулы называются валентными, а какие ? деформационными. Привести примеры. Чему равна колебательная энергия многоатомной молекулы. Число колебательных степеней свободы у молекулы, содержащей N атомов. Резонанс Ферми. Аналитические применения колебательных спектров.

Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

На чём основываются аналитические применения электронных спектров? Как образование комплекса отражается на электронном спектре поглощения соединения? На чём основаны спектрофотометрические методы исследования равновесий в растворе? Как оптическая плотность вещества в растворе связана с его концентрацией? Что происходит с молекулами вещества, когда на них действует ультрафиолетовое или видимое излучение? Почему электронные спектры многоатомных молекул обычно исследуются как спектры поглощения, а не как спектры эмиссионные?

Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

В каких областях спектра проявляются переходы между электронными состояниями молекулы? Как формулируется закон Ламберта-Бугера-Бера? Что лежит в основе абсорбционного метода количественного анализа растворов? Какую информацию можно получить из электронных спектров поглощения в конденсированной фазе? Когда выполняется закон Ламберта-Бугера-Бера, если нет инструментальных ошибок?

Тема 29. Спектры люминесценции.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Вышеприведенные вопросы, задания и тесты ведут к развитию следующих компетенций: ПК-1, ПК-2, ПК-4, ПК-5.

Вопросы к зачету:

1. Спектр атома водорода. Уровни энергии атома. Серийные закономерности. Правила отбора.
2. Серии Лаймана, Бальмера, Пашена. Тонкая структура спектра водорода. Лэмбовский сдвиг.
3. Принцип Паули.
4. Заполнение электронных оболочек. Свойства элементов с заполненными и незаполненными оболочками.
5. Систематика спектров многоэлектронных состояний.
6. Спектры щелочных металлов и сходных с ними ионов.
7. Спектры Ag, Cu, Au.
8. Спектры щелочноземельных элементов.
9. Спектры Zn, Cd, Hg.
10. Сложение орбитальных и спиновых моментов. Типы связи.
11. Состояния эквивалентных электронов: два электрона, три электрона.
12. Спектры элементов с оболочками p, p², p³, p⁴, p⁵, p⁶ (инертные газы).
13. Спектры элементов с достраивающимися d- и f-оболочками.
14. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями.
15. Дипольное излучение.
16. Естественная ширина уровней энергии и спектральных линий. Интенсивности в спектрах.

Билет 1

1. Молекула как жесткий ротатор. Спектр жесткого ротатора.
2. Метод молекулярных орбиталей.

Билет 2

1. Молекула как гармонический осциллятор. Уровни энергии и спектр.
2. Метод валентных связей.

Билет 3

1. Молекула как ангармонический осциллятор. Уровни энергии и спектр.
2. Определение электронных состояний из разъединенных атомов.

Билет 4

1. Колебательный спектр комбинационного рассеяния.
2. Принцип Франка-Кондона.

Билет 5

1. Колеблющийся ротатор. Спектр колеблющегося ротатора.
2. Взаимодействие вращательного движения с электронным движением. Связи Гунда.

Билет 6

1. Распределение интенсивности в колебательно-вращательных спектрах.
2. Типы электронных переходов.

Билет 7

1. Колебательная структура электронных полос. Серии Деландра.
2. Сплошной спектр термов и диссоциация молекул. Функция Морзе.

Билет 8

1. Вращательная структура электронных полос. Образование канта. Оттенение полос.
2. Классификация электронных переходов для молекул органических соединений.

Билет 9

1. Распределение интенсивности во вращательной структуре электронных полос.
2. Расчет термодинамических функций через суммы по состояниям.

Билет 10

1. Свойства симметрии вращательных состояний. Положительные и отрицательные

вращательные уровни.

2. Интенсивности линий в КР-спектре.

Билет 11

1. Вращательный комбинационный спектр.

2. Определение молекулярных термов из состояний объединенного атома.

Билет 12

1. Вывод типов термов молекулы на основе заданной электронной конфигурации.

2. Зависимость потенциальной энергии двухатомной молекулы от межъядерного расстояния.

Билет 13

1. Колебательно-вращательный спектр двухатомной молекулы. Р и R ветви.

2. Элементы симметрии молекул. Точечные группы средней симметрии.

Билет 14

1. Молекула как ангармонический осциллятор. Уровни энергии и спектр.

2. Элементы симметрии молекул. Точечные группы низшей симметрии.

Билет 15

1. Спектроскопическое определение энергии диссоциации двухатомных молекул.

2. Характеристичность частот колебаний многоатомных молекул.

Билет 16

1. Классическое решение задачи о малых колебаниях многоатомных молекул.

2. Флуоресценция и фосфоресценция как виды люминесценции.

Билет 17

1. Квантовомеханическое решение колебательной задачи.

2. Изотопический эффект в спектрах двухатомных молекул.

7.1. Основная литература:

1. Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич ; предисл. чл.-корр. РАН Л. А. Грибова .Изд. 7-е . Москва : URSS : Ленанд, 2015. 527 с..

2. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная спектроскопия / М. А. Ельяшевич ; предисл. чл.-корр. РАН Л. А. Грибова . Изд. 6-е . Москва : URSS : ЛИБРОКОМ, 2012. 415 с.

3. Атомная и молекулярная спектроскопия. Общие вопросы спектроскопии / М. А. Ельяшевич ; предисл. чл.-корр. РАН Л. А. Грибова . Изд. стер. Москва : URSS : [ЛИБРОКОМ, 2014 . 236 с.

4. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Под ред. проф. Ф.Ф. Литвина. - М.: НИЦ Инфра-М, 2013. - 263 с. //

<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=352873>

5. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов: Учебное пособие. - СПб.: Издательство " Лань", 2010. - 656 с. // <http://e.lanbook.com/view/book/625/>

7.2. Дополнительная литература:

1. Шпольский Э.В. Атомная физика, т.1. Введение в атомную физику. - СПб.: Издательство "Лань", 2010 // <http://e.lanbook.com/view/book/442/>
2. Камалова Д.И. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии: учебное пособие / Д.И. Камалова, М.Х. Салахов. - Казань: Казанский государственный университет, 2009. 167 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

American Institute of Physics (AIP) - <http://scitation.aip.org/>
Elsevier (Science Direct) - <http://www.sciencedirect.com/>
Научная электронная библиотека - <http://www.elibrary.ru>
ЭБС ZNANIUM.COM - <http://znanium.com/>
Электронно-библиотечная система Издательства "Лань" - <http://lanbook.com/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Атомная и молекулярная спектроскопия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебная аудитория для проведения лекционных занятий. Лаборатория по спектроскопии для проведения лабораторных занятий.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.03.02 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Камалова Д.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х. _____

"__" _____ 201__ г.