

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 БЗ.ДВ.7

Направление подготовки: 011200.62 - 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 66316

Казань
2016

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 "Б3.ДВ.7 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 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
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей
ОПК-5 (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-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

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований

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

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 7 зачетных(ые) единиц(ы) 252 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет 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	4	0	
2.	Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов.	7	2	2	4	0	
3.	Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний.	7	3-5	4	8	0	
4.	Тема 4. Сложение орбитальных и спиновых моментов.	7	6	2	0	0	
5.	Тема 5. Спектры элементов с оболочками p, p ₂ , p ₃ , p ₄ , p ₅ , p ₆ (инертные газы). Спектры элементов с достраиваемыми d- и f-оболочками.	7	7-8	4	4	0	
6.	Тема 6. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями. Дипольное излучение. Сила осциллятора.	7	9	4	0	0	
7.	Тема 7. Ширина уровней энергии и спектральных линий.	7	10	2	0	0	
8.	Тема 8. Молекула как система взаимодействующих частиц. Разделение энергии молекулы на составляющие.	7	11	2	0	0	
9.	Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор.	7	12	2	4	0	
10.	Тема 10. Молекула как гармонический осциллятор.	7	13	2	4	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	
11.	Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор.	7	14	4	4	0	
12.	Тема 12. Спектры комбинационного рассеяния света.	7	15	2	0	0	
13.	Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор.	7	16	4	4	0	
14.	Тема 14. Распределение интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах.	8	17	2	0	0	
15.	Тема 15. Колебательная структура электронных полос.	8	18	2	6	0	
16.	Тема 16. Вращательная структура электронных полос.	8	18	1	0	0	
17.	Тема 17. Классификация электронных состояний молекулы. Связи Гунда.	8	19	2	0	0	
18.	Тема 18. Свойства симметрии собственных функций молекул.	8	19	1	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	2	0	0	
21.	Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным.	8	22,23	1	4	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	
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	1	0	0	
24.	Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул.	8	26,27	2	2	0	
25.	Тема 25. Колебательная задача для молекул при учете свойств симметрии.	8	28	2	0	0	
26.	Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.	8	29,30	2	6	0	
27.	Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул.	8	31,32	2	2	0	
28.	Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.	8	33,34	1	8	0	
29.	Тема 29. Спектры люминесценции.	8	35	1	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	зачет
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	экзамен
	Итого			64	66	0	

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. Серии Лаймана, Бальмера, Пашена. Тонкая структура спектра водорода. Лэмбовский сдвиг.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Ознакомление со спектром излучения водорода, полученным с помощью водородной и дейтериевой ламп. Установление сериальных закономерностей по диаграммам Гроттриана. Определение изотопического сдвига спектра дейтерия по отношению к спектру водорода с использованием спектрограмм, прилагаемых к комплексу Didactic Lab.

Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

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

практическое занятие (4 часа(ов)):

Анализ спектров многоэлектронных атомов на примере конкретных элементов (по указанию преподавателя).

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.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Качественный спектральный анализ смесей солей металлов на основе оптических спектров атомов (состав анализируемого образца указывает преподаватель)

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.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Рассмотрение спектров элементов с p-оболочками на примере атомов азота, хлора, алюминия и других.

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

лекционное занятие (4 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. Допплеровская 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.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Решение задач на вращательные спектры двухатомных молекул. Задачи приведены в приложении к программе.

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.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Решение задач на колебательные спектры двухатомных молекул. Задачи приведены в приложении к программе.

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.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Решение задач на колебательные спектры двухатомных молекул с учетом ангармонизма колебаний. Задачи приведены в приложении к программе.

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 (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (4 часа(ов)):

Определение вращательной постоянной молекулы оксида углерода по колебательно-вращательному спектру.

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.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Ознакомление с колебательной структурой электронных полос поглощения молекулы йода. Построение кривых потенциальной энергии молекулы для основного и возбужденного электронных состояний.

Тема 16. Вращательная структура электронных полос.

лекционное занятие (1 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 (1 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 (2 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 (1 часа(ов)):

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

практическое занятие (4 часа(ов)):

Вычисление статистических сумм по состояниям и термодинамических функций на основании спектроскопических данных для конкретных двухатомных молекул (по указанию преподавателя).

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 (1 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 (2 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.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Описание нормальных колебаний конкретных типов многоатомных молекул (по указанию преподавателя).

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 (2 часа(ов)):

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

практическое занятие (6 часа(ов)):

Проведение идентификации конкретных органических соединений по колебательным спектрам с учетом характеристических частот колебаний.

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.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Рассмотрение примеров молекул с различным распределением электронной плотности.

Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

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

практическое занятие (8 часа(ов)):

Определение состава молекулярных комплексов по электронным спектрам поглощения. Определение состава двухкомпонентной смеси по электронным спектрам поглощения.

Тема 29. Спектры люминесценции.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

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

практическое занятие (2 часа(ов)):

Рассмотрение различных практических применений люминесцентной спектроскопии.

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	Выполнение практических заданий	4	проверка выполненных заданий
3.	Тема 3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Систематика спектров многоэлектронных состояний.	7	3-5	Выполнение практических заданий	6	проверка выполненных заданий

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Спектры элементов с оболочками p, p ₂ , p ₃ , p ₄ , p ₅ , p ₆ (инертные газы). Спектры элементов с достраиваемыми d- и f-оболочками.	7	7-8	Выполнение практических заданий	6	устный опрос
9.	Тема 9. Двухатомные молекулы. Молекула как жесткий ротатор.	7	12	Решение задач, подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
10.	Тема 10. Молекула как гармонический осциллятор.	7	13	Подготовка к тестированию	4	тесты
11.	Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор.	7	14	Выполнение практических заданий	4	проверка выполненных заданий
13.	Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор.	7	16	Выполнение практических заданий	8	проверка выполненных заданий
15.	Тема 15. Колебательная структура электронных полос.	8	18	Выполнение практических заданий	8	проверка выполненных заданий
20.	Тема 20. Электронные состояния и химическая связь в молекулах. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей.	8	21	Выполнение практических заданий	4	проверка выполненных заданий
22.	Тема 22. Многоатомные молекулы. Элементы симметрии и точечные группы симметрии молекул.	8	24,25	Подготовка к устному опросу	4	устный опрос
23.	Тема 23. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.	8	26	Подготовка к устному опросу	4	устный опрос
24.	Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул.	8	26,27	Подготовка к тестированию	4	тесты
26.	Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.	8	29,30	Выполнение практических заданий	8	проверка выполненных заданий

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
27.	Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул.	8	31,32	Подготовка к устному опросу	4	устный опрос
28.	Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.	8	33,34	Выполнение практических заданий	8	проверка выполненных заданий
29.	Тема 29. Спектры люминесценции.	8	35	Подготовка докладов о применениях спектров люминесценции сложных молекул.	6	доклад
	Итого				86	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Качество обучения достигается за счет использования следующих форм учебной работы: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студентов (выполнение индивидуальных домашних заданий), 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.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Вопросы для проверки выполненных заданий: Спектр атома водорода. Изотопический сдвиг. Спектральные серии Бальмера, Лаймана, Бреккета, Пашена.

Тема 2. Формирование электронных оболочек сложных атомов.

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

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Вопросы для проверки выполненных заданий: Порядок заполнения электронных оболочек атомов. Анализ спектров химических элементов по группам Периодической системы.

Тема 4. Сложение орбитальных и спиновых моментов.

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

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы к устному опросу: Строение электронных оболочек. Характеристика спектров элементов с одним и двумя p-электронами. Спектры элементов с тремя и большим числом p-электронов. Спектры атомов инертных газов. Спектры атомов с достраивающейся d-оболочкой. Спектры элементов группы железа. Характеристика спектров элементов с достраивающейся f-оболочкой.

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.

тесты , примерные вопросы:

Ответы на вопросы в виде тестов. Тесты прилагаются к программе.

Тема 11. Молекула как ангармонический осциллятор.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Задание: построение потенциальных кривых для молекул, указанных преподавателем

Тема 12. Спектры комбинационного рассеяния света.

Тема 13. Молекула как колеблющийся ротатор.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Задание: Определение вращательных постоянных, моментов инерции, энергии диссоциации, межатомного расстояния двухатомной молекулы.

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

Тема 15. Колебательная структура электронных полос.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Вопросы для проверки выполненных заданий: Электронно-колебательные спектры поглощения. 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.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Задание: Продемонстрировать применение методов валентных связей и молекулярных орбиталей на примерах двухатомных молекул и ионов.

Тема 21. Расчет термодинамических функций по спектроскопическим данным.

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

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы к устному опросу: Элементы симметрии молекул. Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Порядок группы. Примеры молекул, относящихся к различным точечным группам симметрии.

Тема 23. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Вопросы к устному опросу: Энергия вращательного движения многоатомных молекул различного типа симметрии. Вращательные спектры симметричного и асимметричного волчков.

Тема 24. Колебательные спектры многоатомных молекул.

тесты , примерные вопросы:

Тесты прилагаются к программе.

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

Тема 26. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.

проверка выполненных заданий , примерные вопросы:

Вопросы для проверки выполненных заданий: Правила отбора в колебательных спектрах многоатомных молекул. Характеристичность частот колебаний. Идентификация органических соединений с помощью групповых частот по инфракрасным спектрам поглощения.

Тема 27. Электронные состояния многоатомных молекул.

устный опрос, примерные вопросы:

Вопросы устного опроса: Виды химических связей в многоатомных молекулах. Применение теории направленной валентности. Гибридизация орбиталей. Примеры.

Тема 28. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.

проверка выполненных заданий, примерные вопросы:

Вопросы для проверки выполненных заданий: Примеры использования электронной спектроскопии в качественном и количественном анализе веществ.

Тема 29. Спектры люминесценции.

доклад, примерные вопросы:

Примерные темы рефератов по разделу: Применения люминесцентной спектроскопии в науке и технике: Структурный анализ. Качественный и количественный анализ. Поляризационные методы люминесцентного анализа. Флуоресцентные зонды. Изучение диффузионного движения молекул. Флуоресцентная спектроскопия молекулярных релаксаций.

Тема . Итоговая форма контроля

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету и экзамену:

Вышеприведенные вопросы, задания и тесты ведут к развитию следующих компетенций: ОПК-1, ОПК-2, ОПК-5, ПК-1, ПК-2, ПК-4, ПК-5, ПК-6.

Вопросы к зачету:

1. Спектр атома водорода. Уровни энергии атома. Сериальные закономерности. Правила отбора.
2. Сери 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 Р 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. 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>
2. Шпольский Э.В. Атомная физика, т.1. Введение в атомную физику. - СПб.: Издательство "Лань", 2010 // <http://e.lanbook.com/view/book/442/>
3. 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. Теория оптических спектров : учебное пособие / А. М. Леушин ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. агентство по образованию, Казан. гос. ун-т .? Казань : Изд-во Казанского государственного университета, Ч. 1: Классические методы .? 2007 .? 107 с.
2. Камалова Д.И. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии: учебное пособие / Д.И. Камалова, М.Х. Салахов. - Казань: Казанский государственный университет, 2009. -167 с.
3. Молекулярная спектроскопия биологических сред : учеб. пособие / В. М. Сидоренко .? М. : Высш. шк., 2004 .? 190 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 "Лан" - <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.

Учебные аудитории для проведения лекционных и практических занятий.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Камалова Д.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х. _____

"__" _____ 201__ г.