

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

Направление подготовки (специальность) 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Профиль подготовки (специализация)

Форма обучения очная

Год набора 2024

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 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 высшего образования:

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, организовывает и проводит научные и прикладные исследования, используя знания в области фундаментальной и прикладной физики	Знать теоретические предпосылки и принципы формирования энергетической структуры атомов и молекул на основе классических и квантово-механических представлений; спектральные характеристики атомов, изолированных и взаимодействующих со средой молекул Уметь классифицировать спектры (электронные, колебательные, вращательные); делать количественные оценки энергии на основе принятых моделей (одноэлектронный атом, ротатор, гармонический, ангармонический осцилляторы, метод линейно комбинации атомных орбиталей и др). Владеть методами описания взаимодействий в квантовой системе и взаимодействия электромагнитного излучения с атомами и молекулами; терминологией, принятой в области спектроскопии

ПК-1.2 Анализирует отечественные и зарубежные достижения в области фундаментальной и прикладной физики для осуществления выбора форм и методов научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем научного исследования	Знать основные экспериментальные методы, используемые в области современной спектроскопии атомов и молекул Уметь оценивать информативность современных спектральных методов. Владеть методами количественных оценок энергетических и пространственных характеристик атомов и молекул
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	Знать подходы и методы описания взаимодействия излучения с веществом. Уметь делать количественные оценки, применять принятые модели. Владеть терминологией, принятой при описании взаимодействия излучения с атомами и молекулами
ПК-2.2 Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	Знать общие принципы воздействия рентгеновского и лазерного излучения на атомы и молекулы. Уметь извлекать информацию о пространственной и энергетической структуре вещества на основе спектральных методов, использующих высокоэнергетичные воздействия на вещество. Владеть методами количественных и качественных оценок характеристик атомов и молекул на основе полученных спектральных данных

Дисциплина реализуется без применения ЭО и ДОТ

2 Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр
		б
Общая трудоемкость дисциплины	4 (144)	4 (144)
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	2 (72)
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
практические занятия	1 (36)	1 (36)
Самостоятельная работа обучающихся	1 (36)	1 (36)
Вид промежуточной аттестации (Экзамен)	36	Экзамен

3 Содержание дисциплины (модуля)

№ п/п	Вид работ	Темы занятия	Объем часов	Семестр /курс	Часы в эл. формате
Раздел 1. Спектроскопия атомов					
1.	Лек	Предмет атомной спектроскопии. Основные понятия физические величины, используемые в спектроскопии. Методы атомной спектроскопии, их информативность и практическая значимость	2	6	
2.	Лек	Спонтанные и вынужденные переходы. Коэффициенты Эйнштейна. Время жизни в возбужденном состоянии. Сила перехода. Сила осциллятора.	2	6	
3.	Лек	Спин-орбитальное взаимодействие	2	6	
4.	Лек	Атом водорода: классическая и квантовая теория	2	6	
5.	Лек	Систематика состояний электронов в многоэлектронных атомах. Центральное-симметричное поле. Систематика состояний	2	6	
6.	Лек	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	6	
7.	Лек	Спектры щелочных металлов. Серийные закономерности. Тонкая структура. Спектры Cu, Au, Ag. Спектры щелочно-земельных элементов. Спектры Zn, Cd, Hg. Смещенные термы. Автоионизация	2	6	
8.	Лек	Спектры атомов с заполняющимися p-, d- и f-оболочками.	2	6	
9.	Пр	Основные константы и физические величины, используемые в спектроскопии и связь между ними	2	6	
10.	Пр	Расчет констант скоростей спонтанных и вынужденных переходов	2	6	
11.	Пр	Спин-орбитальное расщепление в магнитном поле (эффект Зеемана)	2	6	
12.	Пр	Расчет энергетической структуры атома водорода	2	6	
13.	Пр	Четность состояний, правила отбора по четности	2	6	
14.	Пр	Нахождение термов многоэлектронных конфигураций в приближении L-S и j-j связи	2	6	
15.	Пр	Спектральные закономерности щелочных металлов, дублетное расщепление	2	6	
16.	Пр	Расчет термов многоэлектронных конфигураций атомов с заполняющимися p, d и f – оболочками.	2	6	
17.	Пр	Промежуточная аттестация (выполнение теста по 1 разделу)	2	6	
18.	Ср		12	6	
Раздел 2. Спектроскопия изолированных молекул					
1.	Лек	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	6	
2.	Лек	Колебательная спектроскопия двухатомных молекул. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Модель колеблющегося ротатора.	2	6	
3.	Лек	Электронные состояния и химическая связь двухатомных молекул. Молекулярные орбитали. Приближение ЛКАО. Классификация электронных состояний.	2	6	

4.	Лек	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	6	
5.	Лек	Равновесная конфигурация молекулы и ее свойства симметрии. Форма и размеры молекулы. Понятие точечных групп симметрии	2	6	
6.	Лек	Модель сферического, симметричного, асимметричного волчков многоатомной молекулы. Информативность вращательных спектров	2	6	
7.	Лек	Выбор колебательных координат. Нормальные колебания многоатомной молекулы. Квантово-механическое решение задачи о нормальных колебаниях. Анггармонизм. Симметрия колебательных состояний. Правила отбора по симметрии. Информативность колебательных спектров.	2	6	
8.	Лек	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	6	
9.	Лек	Классификация молекул на простые, полусложные, сложные. Образование электронных полос поглощения и испускания сложных молекул. Диаграмма Яблонского	2	6	
10.	Пр	Вращательная и колебательная структура спектров двухатомных молекул	2	6	
11.	Пр	Построение молекулярных орбиталей методом ЛКАО.	2	6	
12.	Пр	Заполнение таблицы Деландра, построение диаграммы Фортра.	4	6	
13.	Пр	Принадлежность молекул к группам симметрии, определение типов колебаний	2	6	
14.	Пр	Расчет параметров асимметрии волчков	2	6	
15.	Пр	Промежуточная аттестация (выполнение теста по 2 разделу)	2	6	
16.	Пр	Выступление с рефератами на тему «Экспериментальные методы спектроскопии»	2	6	
17.	Пр	Выступление с рефератами на тему «Экспериментальные методы спектроскопии»	2	6	
18.	Ср		12	6	
Раздел 3. Спектроскопия связанных молекул					
1.	Лек	Классификация межмолекулярных взаимодействий. Универсальные взаимодействия. Специфические взаимодействия.	2	6	
2.	Ср		12	6	
3.	Экзамен		36	6	

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, 1982. - 407 с..
2. Флайгер У. Х., Ельяшевич М. А. Строение и динамика молекул: Том 2: в 2-х томах : перевод с английского. - Москва: Мир, 1982. - 413-872 с..
3. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 2. Атомная спектроскопия: в 3-х ч.. - Москва: URSS, 2008. - 415 с..
4. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 3. Молекулярная спектроскопия: в 3-х ч.. - Москва: URSS, 2008. - 527 с..
5. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 1. Общие вопросы спектроскопии: [в 3-х ч.]. - Москва: URSS, 2010. - 236 с..
6. Демтрёдер В., Мельников Л. А. Современная лазерная спектроскопия: [учебное пособие]. - Долгопрудный: Интеллект, 2014. - 1071 с..
7. Лакович Д. Р., Кузьмин М. Г. Основы флуоресцентной спектроскопии: перевод с английского. - Москва: Мир, 1986. - 496 с..
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, 2006. - 286 с..

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 Windows Professional 10 Russian. Операционная система Windows.

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

1. Мир математических уравнений <http://eqworld.ipmnet.ru>
2. Поисковая машина электронных книг <http://www.poiskknig.ru>
3. Файловый архив для студентов <http://www.studfiles.ru>

5 Фонд оценочных средств

Фонд оценочных средств является приложением к рабочей программе дисциплины (модуля), хранится на кафедре, обеспечивающей преподавание данной дисциплины (модуля).

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

помещение для самостоятельной работы обучающихся: специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, АРМ обучающихся, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

учебная аудитория для проведения лекционных, семинарских и практических занятий: Специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

По дисциплине (модулю)/ практике Б1.В.02 Спектроскопия атомов и молекул

Направление подготовки/специальность

03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Образовательная программа

03.05.02.30 Фундаментальная и прикладная физика

1. Перечень компетенций с указанием индикаторов их достижения, соотнесенных с результатами обучения по дисциплине (модулю), практики и оценочными средствами

Семестр ¹	Код и содержание индикатора компетенции	Результаты обучения ²	Оценочные средства ³
ПК-1: Способен применять знания в области фундаментальной и прикладной физики в научно-исследовательских и прикладных работах			
6	ПК-1.1: Планирует, организывает и проводит научные и прикладные исследования, используя знания в области фундаментальной и прикладной физики	Знать: 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.	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		Уметь: классифицировать спектры (электронные, колебательные, вращательные); делать оценки на основе принятых моделей (водородоподобный атом, ротатор, осциллятор и др)	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		Владеть: методами описания воздействия электромагнитного излучения на атомы и молекулы; терминологией, принятой в области спектроскопии	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
6	ПК-1.2: Анализирует отечественные и зарубежные достижения в области фундаментальной и прикладной физики	Знать: основные стандартные программные средства для поиска научной литературы по заданным критериям;	Реферат

¹ Семестры указываются по порядку, для каждого индикатора

² Указываются результаты обучения по дисциплине (модулю), практике, соотнесенные с индикатором достижения компетенции.

³ Указываются оценочные средства для каждого индикатора.

	для осуществления выбора форм и методов научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем научного исследования	<p>Уметь: проводить анализ отечественного и зарубежного опыта по спектроскопии атомов и молекул; классифицировать спектры (электронные, колебательные, вращательные) и делать оценки эффективности воздействия излучения на молекулы; извлекать информацию об энергетической структуре молекул на основе их оптических спектров</p>	Реферат
		<p>Владеть: навыками поиска необходимой научной информации из оригинальных источников; навыками организации самостоятельной работы; навыками правильно описывать и излагать результаты исследований в реферативной форме</p>	Реферат
ПК-2: Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях			
6	ПК-2.1: Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	<p>Знать: принцип работы спектральных приборов; совокупность факторов, влияющих на точность экспериментальных результатов; методы получения спектров поглощения и испускания</p>	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		<p>Уметь: извлекать необходимую для спектральных измерений информацию на основе руководства пользователя современных спектральных приборов;</p>	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		<p>Владеть: методами обработки первичных данных; навыками сопоставления экспериментальных данных базовым физическим моделям</p>	Тест; Реферат; Контрольные вопросы

6	ПК-2.2: Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	Знать: основные характеристики инструментальных средств (спектральных приборов), необходимых для решения научной задачи	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		Уметь: определять необходимый набор экспериментальных методик для решения определенной научно-исследовательской задачи	Тест; Реферат; Контрольные вопросы
		Владеть: навыками поиска информационных ресурсов для определения инструментальных решений в области воздействия электромагнитного излучения на вещество	Тест; Реферат; Контрольные вопросы

2. Типовые оценочные средства или иные материалы, с описанием шкал оценивания и методическими материалами, определяющими процедуру проведения и оценивания достижения результатов обучения

Тестовые задания

Тест по модулю 1 (спектроскопия атомов)

- Для каких элементов терм 4S является основным:
А) К; Б) С; В) Ne; Г) Cu; Д) ни один из предложенных
- В переходах каких элементов наблюдаются интенсивные интеркомбинационные линии:
А) Ne; Б) Hg; В) Zr; Г) Be; Д) ни один из предложенных.
- Какой элемент имеет максимальную энергию ионизации:
А) Au; Б) Fr; В) He; Г) Fe.
- Какой элемент в основном состоянии обладает максимальной мультиплетностью:
А) F; Б) C; В) Pd; Г) Mn.
- Какой из термов является пятикратно вырожденным по магнитному квантовому числу:
А) 1D ; Б) 3P ; В) 1S ; Г) 2P ; Д) ни один из предложенных.

6. В спектрах каких элементов будут наблюдаться отклонения от нормальной связи:
 А) Kr; Б) Pb; В) Al; Г) P; Д) ни один из предложенных.
7. В спектрах каких элементов будет наблюдаться дублетная структура:
 А) Ar; Б) Li; В) Al; Г) Cd; Д) ни один из предложенных.
8. В спектрах каких элементов будет наблюдаться триплетная структура:
 А) C; Б) Na; В) Ar; Г) F; Д) ни один из предложенных.
9. У каких элементов терм 3P_2 лежит ниже терма 3P_1 :
 А) S; Б) O; В) C; Г) Si; Д) ни один из предложенных.
10. Электронная конфигурация nd^2 в случае нормальной связи дает следующие термы:
 А) 3P ; Б) 3D ; В) 1S ; Г) 1F ; Д) ни один из предложенных.
11. Какие из электронных конфигураций четные:
 А) p^5s ; Б) sp^4 ; В) ff ; Г) p^3d^2 ; Д) ни один из предложенных
12. Какие из переходов запрещены правилами отбора:
 А) $^3P_1 - ^3D_2$; Б) $^1S_0 - ^3P_1$; В) $^1S_0 - ^1P_1$; Г) $^2P_{1/2} - ^2D_{5/2}$;
 Д) ни один из предложенных

Тест по модулю 2 (спектроскопия молекул)

1. Волчок, образованный молекулой O_3 , является:
 А. сферическим;
 Б. симметричным вытянутым;
 С. симметричным сплюснутым;
 Д. ассиметричным.
2. Молекула Cl_2 представлена следующими электронными термами:
 А. $^3\Phi$;
 Б. $^2\Pi$;
 С. $^1\Sigma$;
 Д. $^3\Delta$
3. Верхняя молекулярная орбиталь молекулы N_2 в основном электронном состоянии является:
 А. четной разрыхляющей;
 Б. четной связывающей;
 С. нечетной разрыхляющей;
 Д. нечетной связывающей.

4. Максимальное число колебательных уровней двухатомной молекулы с энергией колебательного кванта 2010 см^{-1} и постоянной ангармонизма 15 см^{-1} лежит в пределах:

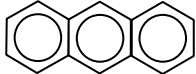
- А. 30-60;
- Б. 60-70;
- С. 130-140;
- Д. 140-180.

5. Принцип Франка-Кондона заключается в следующем утверждении:

- А. Наиболее вероятны электронные переходы, соответствующие неизменной мгновенной конфигурации ядер;
- Б. Энергию молекулы можно представить в виде суммы электронной, колебательной и вращательной энергий.
- С. Разрешены такие переходы, для которых симметрия рассматриваемой составляющей дипольного момента совпадает с симметрией возбужденного электронного уровня;
- Д. Наиболее вероятные переходы соответствуют вертикальным линиям на графике потенциальных кривых

6. Число нормальных колебаний в молекуле этанола составляет:

- А. 9;
- Б. 21;
- С. 22;
- Д. 18.

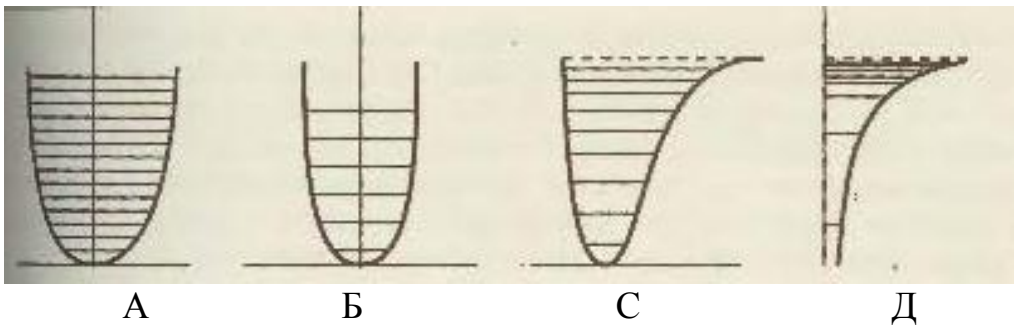
7. Молекула CCl_4 и молекула антрацена () принадлежат группам симметрии

- А. Обе средней;
- Б. обе высшей;
- С. высшей и средней;
- Д. низшей и высшей.

8. Электронная конфигурация $(1s\sigma_g)^2(1s\sigma_u^*)^2(2s\sigma_g)^2(2s\sigma_u^*)^2(2p\sigma_g)^2(2p\pi_u)^4$ принадлежит молекуле:

- А. O_2 ;
- Б. N_2 ;
- С. CO ;
- Д. LiF .

9. На каком рисунке изображено расположение колебательных уровней для гармонических колебаний:



10. Какова кратность Σ -терма в молекуле F_2 :
- А. 2;
 - Б. 4;
 - С. 3;
 - Д. 1.

Методические рекомендации по проведению тестирования:

Тестирование проводится по модулям 1 и 2. На выполнение каждого теста отводится 40 минут.

Критерии оценки тестирования:

За каждый полный правильный ответ студент получает 2 балла. За частично правильный ответ (например, указаны не все варианты правильных ответов, если их больше, чем один) студент получает 1 балл. Таким образом, максимальное количество набранных баллов за два теста составляет **44 балла**.

Темы для реферата по модулю «Экспериментальные методы спектроскопии»:

1. Микроволновая спектроскопия.
2. Инфракрасная спектроскопия.
3. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
4. Абсорбционная электронная спектроскопия.
5. Флуоресцентная спектроскопия.
6. Поляризационные методы флуоресцентной спектроскопии.
7. Время-разрешенные методы флуоресцентной спектроскопии.
8. Спин-резонансная спектроскопия.
9. Спектроскопия одиночных молекул.
10. Современные оптические микроскопические методы.

Методические указания по выполнению реферата:

Реферат должен быть оформлен в соответствии с требованиями Стандарта университета «Общие требования к построению, изложению и оформлению документов учебной деятельности» [Электронный ресурс] / Красноярск: СФУ, 2021, СТУ 7.5-07-2021, <http://www.sfu-kras.ru/node/8127>

Критерии оценки реферата:

За реферат по модулю «Экспериментальные методы спектроскопии» студент получает «зачтено», если набрано от **9 до 16 баллов**:

1. Содержание реферата в целом соответствует теме задания.
2. Продемонстрировано владение понятийно-терминологическим аппаратом дисциплины, отсутствуют ошибки в употреблении терминов. Показано умелое использование категорий и терминов дисциплины. Продемонстрировано умение аргументированно излагать собственную точку зрения. Изложение отчасти сопровождается адекватными иллюстрациями (примерами) из практики.
3. Реферат в достаточной степени структурирован и выстроен в заданной логике без нарушений общего смысла. Части ответа логически взаимосвязаны. Отражена логическая структура проблемы (задания): постановка проблемы – аргументация – выводы. Объем ответа незначительно превышает заданные рамки при сохранении смысла.
4. Достаточная степень самостоятельности, оригинальность в представлении материала.

Контрольные вопросы:

1. Предмет атомной спектроскопии. Методы атомной спектроскопии, их информативность и практическая значимость.
2. Константы скорости переходов для различных атомно-молекулярных движений. Спонтанные и вынужденные переходы. Коэффициенты Эйнштейна. Время жизни в возбужденном состоянии. Сила перехода. Сила осциллятора.
3. Спин-орбитальное взаимодействие.
4. Систематика состояний электронов в многоэлектронных атомах. Центральное-симметричное поле.
5. Систематика состояний. Электростатическое и спин-орбитальное расщепление уровней в приближении $L-S$ связи. Нахождение термов многоэлектронных конфигураций: случай неэквивалентных, эквивалентных электронов и их комбинации. Тонкая структура термов.
6. Систематика состояний электронов в случае $j-j$ связи. Нахождение термов многоэлектронных конфигураций: случай неэквивалентных, эквивалентных электронов и их комбинации.
7. Правила отбора для излучательных переходов.

8. Спектры многоэлектронных атомов. Спектры щелочных металлов. Сериальные закономерности. Тонкая структура. Спектры *Cu, Au, Ag*.

9. Спектры щелочно-земельных элементов. Спектры *Zn, Cd, Hg*. Смещенные термы. Автоионизация.

10. Спектры атомов с заполняющимися *p*-оболочками. Спектры атомов с заполняющимися *d* и *f*-оболочками.

11. 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.

12. Вращательная спектроскопия двухатомных молекул. Модель жесткого и нежесткого ротатора.

13. Колебательная спектроскопия. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Модель колеблющегося ротатора.

14. Колебательно-вращательные спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света.

15. Электронные состояния и химическая связь. Молекулярные орбитали. Классификация электронных состояний.

16. Электронные спектры двухатомных молекул. Правила отбора. Прогрессии. Секвенции. Таблица Деландра.

17. Вращательная структура электронно-колебательных переходов. Диаграмма Фортра. Образование кантов.

18. Принцип Франка-Кондона. Распределение интенсивности в спектрах электронно-колебательных переходов. Взаимодействие электронного и вращательного движений.

19. Равновесная конфигурация молекулы и ее свойства симметрии. Форма и размеры молекулы. Понятие точечных групп симметрии.

20. Многоатомные молекулы. Модель сферического, симметричного, асимметричного волчков. Информативность вращательных спектров.

21. Выбор колебательных координат. Нормальные колебания. Квантово-механическое решение задачи о нормальных колебаниях. Ангармонизм. Симметрия колебательных состояний. Правила отбора по симметрии. Информативность колебательных спектров.

22. 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.

23. Внутримолекулярные взаимодействия колебаний. Классификация молекул на простые, полусложные, сложные. Образование электронных полос поглощения и испускания сложных молекул.

24. Электронная спектроскопия связанных молекул. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Универсальные взаимодействия. Специфические взаимодействия.

25. Экспериментальные методы спектроскопии. Эмиссионный, абсорбционный анализ, ИК-спектроскопия, комбинационное рассеяние, спин-резонансная спектроскопия

Методические рекомендации по проведению зачета:

Форма контроля курса – зачет. Зачет выставляется при условии успешного выполнения тестов по модулю 1 и 2 и защите реферата по модулю 3.

Критерии оценки зачета:

Оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если содержание ответов на контрольные вопросы по модулям 1, 2, 3 было не ниже оценки «удовлетворительно» (в ответе верно изложено не менее 50 % материала и не допущено существенных неточностей), т.е. суммарное количество баллов составляет **не менее 30**;

Оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части программного материала и допускает существенные ошибки; суммарное количество баллов составляет **менее 30**.

Разработчик



Е.А. Слюсарева