

ИНСТИТУТ НАНОТЕХНОЛОГИЙ В ЭЛЕКТРОНИКЕ, СПИНТРОНИКЕ И ФОТОНИКЕ

КАФЕДРА ФИЗИКИ МИКРО- И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО НТС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/04-577

от 27.04.2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**АТОМНАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ (ЧАСТЬ 2)**

Направление подготовки  
(специальность)

[1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
8	2	72	12	12	0		12	0	Э
Итого	2	72	12	12	0	0	12	0	

## АННОТАЦИЯ

Изучение дисциплины дает основные представления о строении атомов и молекул, о современных методах спектроскопии и их применении в смежных областях, физике твердого тела, нанопотонике и т.п.

Курс состоит из следующих основных частей: основы молекулярной спектроскопии, электронно-колебательная спектроскопия многоатомных молекул.

### 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения учебной дисциплины является получение знаний, необходимых для успешной профессиональной деятельности в области исследований, разработок и технологий, направленных на регистрацию и обработку спектральной информации, создание и применение установок и систем в области нанопотоники, физики нанобъектов и конденсированного состояния вещества

### 2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Для успешного освоения дисциплины необходимо прослушать курс общей физики, в части квантовой оптики, физики атомного ядра, а также изучить курс квантовой механики и предшествующий курс "Атомная и молекулярная спектроскопия (часть 1)". Дисциплина необходима студентам для понимания строения сложных атомов и молекул с учетом электростатического и спин-орбитального взаимодействия, а также для последующего изучения фотоники органических и неорганических наноструктур

### 3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
конструкторско-технологический			
Создание программ и комплексов программ на базе стандартных пакетов для выполнения расчетов	комплексы программ для научно-исследовательских и прикладных целей	ПК-5.2 [1] - Способен проводить научные исследования в области оптического приборостроения,	З-ПК-5.2[1] - знать основы физической оптики, теорию интерференции, дифракции,

<p>в рамках математических моделей, участие в разработке новых алгоритмов и компьютерных программ для научно-исследовательских и прикладных целей.</p>		<p>оптических материалов и технологий</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 06.022</p>	<p>временной и пространственной когерентности, закономерности распространения световых пучков в вакууме, основы атомной и молекулярной спектроскопии; У-ПК-5.2[1] - уметь рассчитать оптическую схему, провести оценки параметров материалов; В-ПК-5.2[1] - владеть основами спектроскопии атомов и молекул</p>
--	--	--	---

#### 4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное и трудовое воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование культуры исследовательской и инженерной деятельности (В16)	Использование воспитательного потенциала дисциплин "Основы конструирования и САПР", "Курсовой проект: основы конструирования и САПР", "Инженерная и компьютерная графика", "Детали машин и основы конструирования" для формирования навыков владения эвристическими методами поиска и выбора технических решений в условиях неопределенности через специальные задания (методики ТРИЗ, морфологический анализ, мозговой штурм и др.), культуры инженера-разработчика через организацию проектной, в том числе самостоятельной работы обучающихся с использованием программных пакетов.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование чувства личной ответственности за научно-технологическое развитие России, за результаты исследований и их последствия (В17)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования чувства личной ответственности за достижение лидерства России в ведущих научно-технических секторах и фундаментальных исследованиях,

		<p>обеспечивающих ее экономическое развитие и внешнюю безопасность, посредством контекстного обучения, обсуждения социальной и практической значимости результатов научных исследований и технологических разработок.</p> <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования социальной ответственности ученого за результаты исследований и их последствия, развития исследовательских качеств посредством выполнения учебно-исследовательских заданий, ориентированных на изучение и проверку научных фактов, критический анализ публикаций в профессиональной области, вовлечения в реальные междисциплинарные научно-исследовательские проекты.</p>
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (В18)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования у студентов ответственности за свое профессиональное развитие посредством выбора студентами индивидуальных образовательных траекторий, организации системы общения между всеми участниками образовательного процесса, в том числе с использованием новых информационных технологий.

## 5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практи. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>8 Семестр</i>						
1	Основы молекулярной спектроскопии. КРС, теория симметрии, вращательные спектры.	1-8	6/6/0		25	КИ-8	3-ПК-5.2, У-ПК-5.2, В-ПК-5.2
2	Электронно-колебательная спектроскопия многоатомных молекул.	9-15	6/6/0		25	КИ-15	3-ПК-5.2, У-ПК-5.2, В-ПК-5.2
	<i>Итого за 8 Семестр</i>		12/12/0		50		
	<b>Контрольные мероприятия за 8 Семестр</b>				50	Э	3-ПК-5.2, У-ПК-5.2, В-ПК-5.2

\* – сокращенное наименование формы контроля

\*\* – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
Э	Экзамен

### КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>8 Семестр</i>	12	12	0

1-8	<b>Основы молекулярной спектроскопии. КРС, теория симметрии, вращательные спектры.</b>	6	6	0
1 - 2	<b>Тема 1</b> Основные положения квантовомеханической теории молекул. Порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергии. Принцип Борна Оппенгеймера. Отделение колебаний от вращения. Радиационные переходы, электронные колебательные и вращательные спектры. Интенсивности в спектрах.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
3	<b>Тема 2</b> Основы теории комбинационного рассеяния света. Колебательное и вращательное комбинационное рассеяние света. Характеристики переходов и интенсивности в случае спектров комбинационного рассеяния. Вынужденное комбинационное рассеяние света. Понятие о когерентном актистоксовом рассеянии света. И гигантском комбинационном рассеянии.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
4	<b>Тема 3</b> Основы теории симметрии. Понятие точной группы Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Свойства симметрии равновесных конфигураций молекул. Понятие о представлениях групп, неприводимые представления точечных групп. Связь компонентов дипольного момента и тензора поляризуемости с симметрией молекул. Правила отбора по симметрии.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
5 - 6	<b>Тема 4</b> Вращательные спектры молекул. Вращательные уровни и вращательные переходы линейных молекул. Правила отбора, интенсивности вращательных спектров и заселенности вращательных уровней для линейных молекул. Вращательные уровни молекул типа сферического волчка. Молекулы типа симметричного и ассиметричного волчка. Момент инерции и вращательные постоянные. Вращательные уровни и вращательные переходы для молекул типа ассиметричного волчка. Правила отбора и интенсивности в спектрах.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	<b>Электронно-колебательная спектроскопия многоатомных молекул.</b>	6	6	0
7 - 8	<b>Тема 5</b> Колебательные спектры молекул. Гармонические и ангармонические колебания двухатомных молекул. Интенсивности в спектрах испускания, поглощения и комбинационного рассеяния, правила отбора. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Потенциальная энергия многоатомных молекул. Естественные и нормальные координаты. Ангармонизм колебаний многоатомных молекул. Обертон и составные частоты. Симметрия колебаний многоатомных молекул, координаты симметрии. Правила отбора для радиационных колебательных переходов и комбинационного рассеяния в	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0

	многоатомных молекулах. Резонанс Ферми. Методы колебательной спектроскопии для исследования наноструктур. Понятие о релаксации колебательного возбуждения молекул. Многофотонное возбуждение и диссоциация молекул.			
9 - 10	<b>Тема 6</b> Электронные состояния и спектры двухатомных молекул. Устойчивые и неустойчивые (разлетные) состояния, химическая связь. Характеристика состояний отдельных электронов. Связывающие и антисвязывающие молекулярные электроны и химическая связь. Электронные состояния и химическая связь в ионе молекул водорода. Электронные состояния и химическая связь в молекуле водорода. Метод молекулярных орбиталей и электронных пар. Колебательная структура спектров двухатомных молекул. Принцип Франца-Кондона и относительная интенсивность электронно-колебательных полос. Понятие о фотодиссоциации и преддиссоциации молекул. Вращательная структура электронно-колебательных полос.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
11 - 12	<b>Тема 7</b> Электронные состояния и спектры многоатомных молекул. Электронные состояния и химическая связь многоатомных молекул. Теорема Яна-Теллера. Принцип Франка-Кондона для многоатомных молекул. Правила отбора. Диаграмма Яблонского. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия в многоатомных молекулах. Флюоресценция и фосфоресценция. Многоступенчатое возбуждение и диссоциация многоатомных молекул. Понятие о лазерах на растворах органических красителей. Понятие об электронных спектрах наночастиц и молекулярных кластеров.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

#### ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

Недели	Темы занятий / Содержание
	8 Семестр
1 - 2	<b>Тема 1</b>

	<p>Основные положения квантовомеханической теории молекул. Порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергии. Принцип Борна Оппенгеймера. Отделение колебаний от вращения. Радиационные переходы, электронные колебательные и вращательные спектры. Интенсивности в спектрах.</p>
3	<p><b>Тема 2</b>          Основы теории комбинационного рассеяния света. Колебательное и вращательное комбинационное рассеяние света. Характеристики переходов и интенсивности в случае спектров комбинационного рассеяния. Вынужденное комбинационное рассеяние света. Понятие о когерентном актистоксовом рассеянии света. И гигантском комбинационном рассеянии.</p>
4	<p><b>Тема 3</b>          Основы теории симметрии. Понятие точной группы Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Свойства симметрии равновесных конфигураций молекул. Понятие о представлениях групп, неприводимые представления точечных групп. Связь компонентов дипольного момента и тензора поляризуемости с симметрией молекул. Правила отбора по симметрии .</p>
5 - 6	<p><b>Тема 4</b>          Вращательные спектры молекул. Вращательные уровни и вращательные переходы линейных молекул. Правила отбора, интенсивности вращательных спектров и заселенности вращательных уровней для линейных молекул. Вращательные уровни молекул типа сферического волчка.          Молекулы типа симметричного и ассиметричного волчка. Момент инерции и вращательные постоянные. Вращательные уровни и вращательные переходы для молекул типа ассиметричного волчка. Правила отбора и интенсивности в спектрах.</p>
7 - 8	<p><b>Тема 5</b>          Колебательные спектры молекул. Гармонические и ангармонические колебания двухатомных молекул. Интенсивности в спектрах испускания, поглощения и комбинационного рассеяния, правила отбора. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.          Потенциальная энергия многоатомных молекул. Естественные и нормальные координаты. Ангармонизм колебаний многоатомных молекул. Обертон и составные частоты. Симметрия колебаний многоатомных молекул, координаты симметрии. Правила отбора для радиационных колебательных переходов и комбинационного рассеяния в многоатомных молекулах. Резонанс Ферми. Методы колебательной спектроскопии для исследования наноструктур. Понятие о релаксации колебательного возбуждения молекул. Многофотонное возбуждение и диссоциация молекул.</p>

9 - 10	<p><b>Тема 6</b></p> <p>Электронные состояния и спектры двухатомных молекул. Устойчивые и неустойчивые (разлетные) состояния, химическая связь. Характеристика состояний отдельных электронов. Связывающие и антисвязывающие молекулярные электроны и химическая связь. Электронные состояния и химическая связь в ионе молекул водорода. Электронные состояния и химическая связь в молекуле водорода. Метод молекулярных орбиталей и электронных пар. Колебательная структура спектров двухатомных молекул. Принцип Франца-Кондона и относительная интенсивность электронно-колебательных полос. Понятие о фотодиссоциации и преддиссоциации молекул. Вращательная структура электронно-колебательных полос</p>
11 - 12	<p><b>Тема 7</b></p> <p>Электронные состояния и спектры многоатомных молекул. Электронные состояния и химическая связь многоатомных молекул. Теорема Яна-Теллера. Принцип Франка-Кондона для многоатомных молекул. Правила отбора. Диаграмма Яблонского. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия в многоатомных молекулах. Флюоресценция и фосфоресценция. Многоступенчатое возбуждение и диссоциация многоатомных молекул. Понятие о лазерах на растворах органических красителей. Понятие об электронных спектрах наночастиц и молекулярных кластеров.</p>

## 6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Используются современные предметно- и личностно-ориентированные образовательные технологии

## 7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-5.2	З-ПК-5.2	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-5.2	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-5.2	Э, КИ-8, КИ-15

## Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – <i>«отлично»</i>	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – <i>«удовлетворительно»</i>	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – <i>«неудовлетворительно»</i>	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

## 8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ С21 Carbon Nanoparticles and Nanostructures : , Cham: Springer International Publishing, 2016
2. ЭИ А 92 Атомная физика Т. 2 Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома, : , 2022

3. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия : общие вопросы спектроскопии и пособие для вузов, М. А. Ельяшевич, Москва: Либроком, 2011

4. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия : , М. А. Ельяшевич, Москва: Либроком, 2009

#### ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.1 Ф69 Строение и динамика молекул Т. 2 , , М.: Мир, 1982

2. 539.1 Ф69 Строение и динамика молекул Т.1 , , М.: Мир, 1982

3. 531.2 Г41 Электронные спектры и строение многоатомных молекул : , Герцберг Г.; Пер. с англ., Москва: Мир, 1969

4. 539.2 Г82 Колебания молекул : , Л. А. Грибов, Москва: Либроком, 2009

5. 539.1 Л52 Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах : , Летохов В.С., М.: Наука, 1983

#### ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

#### LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

### **9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

1. Демонстрационный проектор

### **10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ**

При изучении курса студент должен твердо усвоить основные представления о строении атомов и молекул, о современных методах спектроскопии и их применении в смежных областях, физике твердого тела, нанофотонике и т.п.

Студент должен уметь свободно определять сериальные закономерности для «легкого атома» исходя из понятия терма и правил отбора. Должен уметь вычислять отношения интенсивностей в спектрах для типичных случаев. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен твердо усвоить понятие насыщения перехода и уметь делать оценки для лазерной интенсивности насыщения перехода. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен уметь правильно выбрать систему координат для эффективного разделения энергии колебания и вращения. Он должен научиться использовать принцип

адиабатического приближения для приближенного анализа молекулярных спектров. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен уметь использовать теорию возмущений для вывода выражения интенсивности электронных, колебательных и вращательных спектров. Студент должен освоить комбинационное рассеяние и вынужденное комбинационное рассеяние для применения этих знаний при изучении последующих курсов. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен освоить физические закономерности формирования молекулярных вращательных спектров, и уметь продемонстрировать принципы теории симметрии в систематике вращательных спектров для молекул различных типов. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен усвоить принцип независимых колебательных мод молекул и знать границы его применения. Он должен уметь проводить расчет поправок к энергетическим уровням с помощью теории возмущений. В качестве самостоятельной работы – решать задачи, предложенные преподавателем.

Студент должен освоить понятие электронного терма и уметь написать терм для двухатомных молекул. Важно также понимать взаимосвязь электронных термов с симметрией электронных состояний. При изучении электронно-колебательных переходов необходимо освоить принцип Франка-Кондона и уметь показать как он следует из общей теории радиационных переходов. В качестве самостоятельной работы – изучить основы теории химической связи

## **11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ**

Студенты выносят из курса общей физики несколько искаженное представление о терме. Следует подробно объяснить зависимость электростатического расщепления от суммарного спина и суммарного орбитального момента. Первое можно сделать на примере двухэлектронного атома ( атома гелия). Важно дать понятия о коэффициентах Эйнштейна и об их взаимосвязи, а также дать квантово-механический вывод вероятности радиационного перехода и объяснить студентам, что такое матричный элемент оператора дипольного момента и его связь с вероятностью радиационного перехода. Чтобы избежать формального усвоения правил отбора, необходимо объяснить их физическую природу, обусловленную элементарным процессом взаимодействия фотона с атомом. Можно дать понятие о насыщении перехода. Для объяснения типичных спектров атомов различных периодов периодической таблицы, следует активно использовать: понятие спектрального терма, правила отбора, оболочечную модель, теорию тонкого расщепления и т.п. Удобно продемонстрировать некоторые основные принципы спектроскопии многоэлектронного атома на примере работы некоторых атомных и ионных лазеров - таких как лазер на парах меди и золота, иодный лазер, гелий-неоновый лазер. При рассмотрении многоступенчатого возбуждения атомов необходимо использовать понятие насыщения перехода. При этом студенты должны уметь самостоятельно сделать оценки для интенсивности лазерного излучения, требуемой для эффективной многоступенчатой ионизации. В этом разделе необходимо дать понятие о технологии лазерного разделения изотопов, а также аналитических методах детектирования атомарных примесей в конденсированных средах.

Автор(ы):

Чистяков Александр Александрович, д.ф.-м.н., с.н.с.