

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ НАНОТЕХНОЛОГИЙ В ЭЛЕКТРОНИКЕ, СПИНТРОНИКЕ И ФОТОНИКЕ
КАФЕДРА ФИЗИКИ МИКРО- И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО НТС ИНТЭЛ

Протокол № 4

от 23.07.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
АТОМНЫЕ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ФОТОПРОЦЕССЫ (ЧАСТЬ 2)

Направление подготовки [1] 11.03.04 Электроника и наноэлектроника
(специальность)

Семестр	Трудоемкость, кредит.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практических подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
8	3	108	12	24	0	36	0	0	Э
Итого	3	108	12	24	0	36	0	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, нанофотонике 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 нанофотоники, физики нанообъектов 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 "Атомные и молекулярные фотопроцессы (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 неорганическихnanoструктур

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
			научно-исследовательский
Анализ научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по	Материалы, компоненты, электронные приборы, устройства,	ПК-3 [1] - Способен анализировать и систематизировать результаты исследований,	З-ПК-3[1] - Знание законов статистической физики; У-ПК-3[1] - Умение

тематике исследования	установки, методы их исследования, проектирования и конструирования. Технологические процессы производства, диагностическое и технологическое оборудование, математические модели, алгоритмы решения типовых задач в области электроники и наноэлектроники. Современное программное и информационное обеспечение процессов моделирования и проектирования изделий электроники и наноэлектроники. Инновационные технические решения в сфере базовых постулатов проектирования, технологии изготовления и применения электронных приборов и устройств.	определять степень достоверности результатов экспериментальных исследований, сопоставлять полученные результаты с мировым уровнем, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций, баз данных	находить научную информацию в базах данных, выполнять её анализ и систематизацию, представлять результаты своих исследований в виде докладов, отчётов и публикаций.; В-ПК-3[1] - Владение методами обработки результатов измерений
-----------------------	--	---	--

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 научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для: - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для: - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытых и теорий.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование культуры информационной безопасности (В23)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирование базовых навыков информационной безопасности через изучение последствий

		халатного отношения к работе с информационными системами, базами данных (включая персональные данные), приемах и методах злоумышленников, потенциальном уроне пользователям.
--	--	--

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

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

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (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	6/12/0		25	КИ-8	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3
2	Электронно-колебательная спектроскопия многоатомных молекул.	9-12	6/12/0		25	КИ-12	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3
	<i>Итого за 8 Семестр</i>		12/24/0		50		
	Контрольные мероприятия за 8 Семестр				50	Э	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3

* – 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.
	8 Семестр	12	24	0
1-8	Основы молекулярной спектроскопии. КРС, теория симметрии, вращательные спектры.	6	12	0
1 - 2	Тема 1 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 Онлайн 0	3 0	0
3	Тема 2 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 2 Онлайн 0	3 0	0
4	Тема 3 Основы теории симметрии. Понятие точной группы Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Свойства симметрии равновесных конфигураций молекул. Понятие о представлениях групп, непреводимые представления точечных групп. Связь компонентов дипольного момента и тензора поляризуемости с симметрией молекул. Правила отбора по симметрии.	Всего аудиторных часов 1 Онлайн 0	3 0	0
5 - 6	Тема 4 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 1 Онлайн 0	3 0	0
9-12	Электронно-колебательная спектроскопия многоатомных молекул.	6	12	0
7 - 8	Тема 5 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	Всего аудиторных часов 2 Онлайн 0	4 0	0

	колебаний многоатомных молекул. Обертона 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 исследованияnanoструктур. Понятие о релаксации колебательного возбуждения молекул. Многофотонное возбуждение и диссоциация молекул.			
9 - 10	Тема 6 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 предиссоциации молекул. Вращательная структура электронно-колебательных полос.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
	Онлайн	0	0	0
11 - 12	Тема 7 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	4	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
	<i>8 Семестр</i>
1 - 2	Тема 1 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.
3	Тема 2 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.
4	Тема 3 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 .
5 - 6	Тема 4 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 асимметричного волчка. Момент инерции и вращательные постоянные. Вращательные уровни и вращательные переходы для молекул типа асимметричного волчка. Правила отбора и интенсивности в спектрах.
7 - 8	Тема 5 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. Обертона 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 исследованияnanoструктур. Понятие о релаксации колебательного возбуждения молекул. Многофотонное возбуждение и диссоциация молекул.
9 - 10	Тема 6 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
11 - 12	Тема 7 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.
--	---

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-3	З-ПК-3	Э, КИ-8, КИ-12
	У-ПК-3	Э, КИ-8, КИ-12
	В-ПК-3	Э, КИ-8, КИ-12

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 – «отлично»	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		B	
75-84		C	
70-74	4 – «хорошо»	D	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.

65-69			
60-64	3 – «удовлетворительно»	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.
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	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. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия : общие вопросы спектроскопии пособие для вузов, Ельяшевич М.А., Москва: Либроком, 2011
3. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия : , Ельяшевич М.А., Москва: Либроком, 2009
4. ЭИ А 92 Атомная физика Т. 2 Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома, , : , 2022

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.2 Г82 Колебания молекул : , Грибов Л.А., Москва: Либроком, 2009
2. 539.1 Л52 Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах : , Летохов В.С., М.: Наука, 1983
3. 539.1 Ф69 Строение и динамика молекул Т. 2 , Флайгер У., М.: Мир, 1982
4. 539.1 Ф69 Строение и динамика молекул Т.1 , Флайгер У., М.: Мир, 1982
5. 531.2 Г41 Электронные спектры и строение многоатомных молекул : , Герцберг Г., Москва: Мир, 1969

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.

Студен 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.

Студен 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.