

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

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

ОДОБРЕНО УМС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/08-577

от 29.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 16.03.01 Техническая 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, экз./зач./КР/КП
7	2	72	16	32	0		24	0	3
Итого	2	72	16	32	0	0	24	0	

АННОТАЦИЯ

Учебная дисциплина предназначена для ознакомления студентов с основами вращательной, колебательной и электронной спектроскопии молекул, а также для получения навыков практической работы со справочными данными по анализу и идентификации спектров.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- ознакомление студентов с основами вращательной, колебательной и электронной спектроскопии молекул;
- изучение практической работы со справочными данными по анализу и идентификации спектров.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Дисциплина является основой формирования знания студентов в области молекулярной спектроскопии. Студент должен прослушать курс общей физики, знать основы физики твердого тела, основы вакуумной техники, физические основы методов исследования поверхности. Учебная дисциплина не является предшествующей к какому-либо другому курсу.

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			
Применение эффективных методов исследования физико-технических объектов, процессов и материалов. Проведение стандартных и сертификационных	Наноразмерные системы, атомно-молекулярные смеси, масс-спектрометрия и спектрометрия ионной подвижности, композиционные	ПК-2.1 [1] - Способен участвовать в проведении теоретических и аналитических исследований в предметной области, в построении физических,	З-ПК-2.1[1] - Знать физико-теоретические концепции, аналитические методы, методы обработки экспериментальных данных в области физики

испытаний технологических процессов и изделий с использованием современных аналитических средств технической физики.	материалы.	математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений. <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.044, 40.104, 40.167	наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.; У-ПК-2.1[1] - Уметь применять физико-теоретические концепции, аналитические методы, методы обработки экспериментальных данных в области физики наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.; В-ПК-2.1[1] - Владеть аналитическими методами, методами обработки экспериментальных данных в области физики наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.
производственно-технологический			
Использование нормативных документов по качеству, стандартизации и сертификации изделий, элементов экономического анализа в практической	Наноразмерные системы, атомно-молекулярные смеси, масс-спектрометрия и спектрометрия ионной подвижности, композиционные материалы.	ПК-3 [1] - Способен использовать технические средства для определения основных параметров технологического процесса, изучения свойств физико-технических объектов, изделий и материалов	З-ПК-3[1] - Знать технические средства для определения основных параметров технологического процесса, свойств физико-технических объектов, изделий и материалов ; У-ПК-3[1] - Уметь

деятельности.		<i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.136, 40.167	использовать технические средства для определения параметров технологического процесса, свойств физико-технических объектов, изделий и материалов ; В-ПК-З[1] - Владеть техническими средствами определения параметров технологического процесса, изучения свойств физико-технических объектов, изделий и материалов
---------------	--	--	---

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
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/ Практ. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>7 Семестр</i>						
1	Часть 1	1-8	8/16/0		25	КИ-8	3-ПК-2.1, У-ПК-2.1, В-ПК-2.1, 3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3
2	Часть 2	9-16	8/16/0		25	КИ-16	3-ПК-2.1, У-ПК-2.1, В-ПК-2.1, 3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3
	<i>Итого за 7 Семестр</i>		16/32/0		50		
	Контрольные мероприятия за 7 Семестр				50	3	3-ПК-2.1, У-ПК-2.1, В-ПК-2.1, 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
З	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>7 Семестр</i>	16	32	0
1-8	Часть 1	8	16	0
1	Молекулярная спектроскопия как основной источник информации о структуре молекул Классификация спектроскопии. Виды взаимодействия излучений с веществом и характерные области электромагнитного излучения. Методы регистрации спектров. Основные отличия атомных и молекулярных	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		0	0	0

	спектров. Единицы измерений. Ширина и интенсивность спектральных линий. Естественная ширина линий, столкновительное и доплеровское уширение. Факторы, определяющие интенсивность линий: вероятность перехода, заселенность состояний, оптическая длина.			
2	Разделение энергии молекул на части и основные виды спектров Разделение энергии молекул на части и основные виды спектров. Порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергии молекул, причины их различий. Основные положения квантовомеханической теории молекул. Двухатомные и многоатомные молекулы. Основные уравнения.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
3	Вероятности спонтанных и вынужденных переходов Вероятности спонтанных и вынужденных переходов. Коэффициенты Эйнштейна. Время жизни возбужденных состояний. Дипольное излучение. Квадрупольное излучение.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
4	Комбинационное рассеяние Комбинационное рассеяние. Характеристики переходов при комбинационном рассеянии. Рэлееское рассеяние.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
5 - 6	Вращательные спектры молекул. Вращательные спектры молекул. Линейные молекулы. Нелинейные молекулы. Модель жесткого ротатора. Сферический, симметричный и асимметричный волчки. Вращательные уровни линейных молекул.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
7 - 8	Вращательные уровни молекул типа сферического волчка, симметричного волчка, асимметричного волчка Вращательные уровни молекул типа сферического волчка, симметричного волчка, асимметричного волчка. Вытянутый и сплюснутый волчки. Действие внешних полей на вращательные уровни. Эффекты Штарка и Зеемана. Влияние ядерных моментов на вращательные уровни и линии. Сверхтонкая структура. Магнитная и сверхтонкая структура.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-16	Часть 2	8	16	0
9	Колебания двухатомных молекул Колебания двухатомных молекул. Гармонические колебания. Анггармонизм колебаний. Диссоциация двухатомных молекул. Полносимметричные и неполносимметричные колебания.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
10 - 11	Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Вращательная структура колебательно-вращательных полос. Правила отбора. Изотоп-эффект в ИК спектрах.	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
12	Свойства электронных состояний и химическая связь двухатомных молекул Свойства электронных состояний и химическая связь	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		

	двухатомных молекул. Гетерополярная и гомеополярная связи. Классификация электронных состояний двухатомной молекулы как целого.	0	0	0
13	Правила отбора и типы электронных переходов Правила отбора и типы электронных переходов. Сплошные спектры. Преддиссоциация.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
14	Соответствие между электронным состоянием молекулы как целого и образующих атомов Соответствие между электронным состоянием молекулы как целого и образующих атомов. Характеристики отдельных электронов в молекуле и молекулярные электронные оболочки.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
15	Принцип Франка-Кондона Принцип Франка-Кондона. Колебательная структура электронных переходов.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
16	Взаимодействие электронного движения с вращательным Взаимодействие электронного движения с вращательным. Общая характеристика вращательной структуры электронно-колебательных полос.	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		

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>7 Семестр</i>
	Вращательные спектры молекул. Вращательные спектры молекул. Линейные молекулы. Нелинейные молекулы. Модель жесткого ротатора. Сферический, симметричный и асимметричный волчки. Вращательные уровни линейных молекул.
	Колебания двухатомных молекул Колебания двухатомных молекул. Гармонические колебания. Анггармонизм колебаний. Диссоциация двухатомных молекул. Полносимметричные и неполносимметричные колебания.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Дисциплина реализует компетентностный подход и предусматривает широкое использование в учебном процессе активных форм проведения занятий, а также, проведение занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков студентов.

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-2.1	З-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
ПК-3	З-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16

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	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твердо 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 – «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
60-64			

			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 Н23 Spectroscopy and Optical Diagnostics for Gases : , Spearrin, R. Mitchell. , Goldenstein, Christopher S. , Hanson, Ronald K. , Cham: Springer International Publishing, 2016
2. ЭИ Ш77 Атомная и молекулярная спектроскопия : , Шнырёв С.Л., [Москва]: [МИФИ], 2008
3. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия Ч.3 Молекулярная спектроскопия, Ельяшевич М.А., : URSS, 2007
4. 535 К 43 Современные методы оптической спектроскопии технологических сред : учеб. пособие для вузов, Шнырев С.Л., Киреев С.В., Москва: Юрайт, 2019

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия : общие вопросы спектроскопии пособие для вузов, Ельяшевич М.А., Москва: Либроком, 2011
2. 539.2 Ф50 Физические основы методов исследования наноструктур и поверхности твердого тела : учебное пособие для вузов, Троян В.И. [и др.], Москва: МИФИ, 2008

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

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При изучении дисциплины студенту необходимо освоить теоретические основы молекулярной спектроскопии.

Нужно получить представление о классификации спектров электромагнитного излучения по диапазону электромагнитного излучения, видам взаимодействия излучения с веществом, типам энергетических уровней и переходов между ними. Необходимо знать выражения для вероятности спонтанного и вынужденного испускания и вероятности поглощения. Рассмотреть случаи дипольного электрического и магнитного излучения и квадрупольного электрического излучения.

Нужно усвоить структуру вращательных уровней двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора, классификацию молекул на основе соотношения моментов инерции относительно главных осей симметрии. Уметь вывести выражения для энергии вращательных уровней молекул типа сферического волчка, симметричного вытянутого и сплюсненного волчка. Знать, к чему приводит учет нежесткости связи в молекуле. Знать зависимость заселенности вращательных состояний в условиях термодинамического равновесия. Понимать различие в степени вырождения вращательных уровней для сферического, симметричного и асимметричного волчка.

Необходимо знать структуру колебательных уровней двухатомной молекулы и колебательных переходов между ними. Знать выражение для колебательной энергии в приближении гармонического и ангармонического осцилляторов. Знать правила отбора для колебательных переходов. Понимать вращательную структуру (ветви) колебательного спектра.

Нужно иметь представление о системе электронных уровней энергии атома и молекулы. Усвоить понятие молекулярных орбиталей. Вспомнить основные понятия, вводимые для описания электронного состояния молекулы. Разбираться в молекулярных терминах и их связи с атомными состояниями. Понимать, как устроена форма молекулярных орбиталей, используя для основы метод линейной комбинации атомных орбиталей.

Студенту необходимо знать колебательную структуру электронных спектров, тонкую вращательную структуру электронно-колебательных спектров. Знать понятие канта полосы.

Необходимо научиться из спектральных данных рассчитывать молекулярные постоянные. Нужно понимать принцип Франка-Кондона и научиться работать с таблицами Деландра. Необходимо понимать явление изотопного сдвига и уметь решать соответствующие задачи.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

При преподавании дисциплины необходимо дать возможность студентам освоить теоретические основы молекулярной спектроскопии.

Нужно рассказать о классификации спектров электромагнитного излучения по диапазону электромагнитного излучения, видам взаимодействия излучения с веществом, типам энергетических уровней и переходов между ними. Необходимо привести выражения для вероятности спонтанного и вынужденного испускания и вероятности поглощения.

Нужно рассмотреть структуру вращательных уровней двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора, рассмотреть классификацию молекул на основе соотношения моментов инерции относительно главных осей симметрии. Вывести выражения для энергии вращательных уровней молекул типа сферического волчка, симметричного вытянутого и

сплющенного волчка. Объяснить зависимость заселенности вращательных состояний в условиях термодинамического равновесия. Объяснить различие в степени вырождения вращательных уровней для сферического, симметричного и асимметричного волчка.

Необходимо рассмотреть структуру колебательных уровней двухатомной молекулы и колебательных переходов между ними. Получить выражение для колебательной энергии в приближении гармонического и ангармонического осцилляторов. Указать правила отбора для колебательных переходов. Рассмотреть вращательную структуру (ветви) колебательного спектра.

Нужно рассмотреть электронные уровни энергии атома и молекулы. Ввести понятие молекулярных орбиталей. Напомнить основные понятия, вводимые для описания электронного состояния молекулы. Рассмотреть молекулярные термы и их связь с атомными состояниями. Рассказать о форме молекулярных орбиталей, используя для основы метод линейной комбинации атомных орбиталей.

Рассмотреть колебательную структуру электронных спектров. Рассмотреть тонкую вращательную структуру электронно-колебательных спектров. Ввести понятие кванта полосы.

Необходимо научить из спектральных данных рассчитывать молекулярные постоянные. Нужно пояснить принцип Франка-Кондона и научить работать с таблицами Деландра. Необходимо объяснить понятие изотопного сдвига на примере решения задач.

Автор(ы):

Троян Виктор Иванович, д.ф.-м.н., профессор

Борман Владимир Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор

Пушкин Михаил Александрович, к.ф.-м.н.

Белогорлов Антон Анатольевич, к.ф.-м.н., доцент

Рецензент(ы):

Ю.П. Нешименко