

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА ЛАЗЕРНОЙ ФИЗИКИ

ОДОБРЕНО НТС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/04-577

от 27.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
ОСНОВЫ АТОМНОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 12.03.05 Лазерная техника и лазерные
технологии

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
6	3	108	15	15	0		24	0	Э
Итого	3	108	15	15	0	0	24	0	

АННОТАЦИЯ

Предметом курса является изучение физических основ излучения и поглощения электромагнитного поля атомами и молекулами, теории атомных и молекулярных спектров излучения и поглощения, рассмотрение основных положений систематизации энергетических состояний атомов и молекул.

Целью освоения учебной дисциплины “Основы атомной и молекулярной спектроскопии” является повышение уровня подготовки инженеров - физиков, получение студентами фундаментальных знаний о строении материи.

Основные задачи курса:

- изучение теоретических основ взаимодействия излучения с веществом;
- формирование у студентов практических навыков систематизации состояний атомов и молекул.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения учебной дисциплины “Основы атомной и молекулярной спектроскопии” является повышение уровня подготовки инженеров - физиков, получение студентами фундаментальных знаний о строении материи.

Основные задачи курса:

- изучение теоретических основ взаимодействия излучения с веществом;
- формирование у студентов практических навыков систематизации состояний атомов и молекул.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Предметом курса является изучение физических основ излучения и поглощения электромагнитного поля атомами и молекулами, теории атомных и молекулярных спектров излучения и поглощения, рассмотрение основных положений систематизации энергетических состояний атомов и молекул.

Изучение дисциплины “Основы атомной и молекулярной спектроскопии” основано на знании студентами общепрофессиональных математических и физических дисциплин, читаемых им на факультете теоретической и экспериментальной физики.

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-исследовательской			
<p>Анализ поставленной задачи исследований в области лазерной техники и лазерных технологий;- математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований, разработка программ и их отдельных блоков, отладка и настройка для решения задач лазерной техники и лазерных технологий; проведение экспериментальных исследований взаимодействия лазерного излучения с веществом; проведение измерений по заданным методикам с выбором технических средств и обработкой результатов; составление описаний проводимых исследований и разрабатываемых проектов; осуществление наладки, настройки, юстировки и опытной проверки лазерных приборов и лазерных технологических систем;</p>	<p>процессы взаимодействия лазерного излучения с веществом, включая биологические объекты; лазерные приборы, системы и технологии различного назначения; процессы генерации, усиления, модуляции, распространения и детектирования лазерного излучения; программное обеспечение и компьютерное моделирование в лазерной технике и лазерных технологиях.</p>	<p>ПК-1 [1] - Способен к математическому моделированию процессов и объектов лазерной техники и технологий на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и самостоятельно разработанных программных продуктов</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 29.004, 40.011</p>	<p>З-ПК-1[1] - Знать возможности стандартных пакетов автоматизированного проектирования при математическом моделировании объектов лазерной техники и технологий.; У-ПК-1[1] - Уметь решать типичные математические задачи на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования; В-ПК-1[1] - Владеть навыками самостоятельной разработки программ при математическом моделировании процессов и объектов лазерной техники и технологий</p>

<p>Анализ поставленной задачи исследований в области лазерной техники и лазерных технологий;- математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований, разработка программ и их отдельных блоков, отладка и настройка для решения задач лазерной техники и лазерных технологий; проведение экспериментальных исследований взаимодействия лазерного излучения с веществом; проведение измерений по заданным методикам с выбором технических средств и обработкой результатов; составление описаний проводимых исследований и разрабатываемых проектов; осуществление наладки, настройки, юстировки и опытной проверки лазерных приборов и лазерных технологических систем;</p>	<p>процессы взаимодействия лазерного излучения с веществом, включая биологические объекты; лазерные приборы, системы и технологии различного назначения; процессы генерации, усиления, модуляции, распространения и детектирования лазерного излучения; программное обеспечение и компьютерное моделирование в лазерной технике и лазерных технологиях.</p>	<p>ПК-2 [1] - Способен к проведению измерений и исследования различных объектов по заданной методике</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 29.004, 40.011</p>	<p>З-ПК-2[1] - Знать основы электротехники и электроники, основы теории сигналов, основные физические методы измерений и исследований в области профессиональной деятельности.; У-ПК-2[1] - Уметь выбирать и использовать соответствующие ресурсы и оборудование для проведения исследований и измерений ; В-ПК-2[1] - Владеть методами и приемами исследований, а также навыками измерений по заданной методике в области профессиональной деятельности</p>
---	---	---	--

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для:

	<p>технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)</p>	<p>- 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:</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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 открытий и теорий.
--	---	--

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>6 Семестр</i>						
1	Раздел 1	1-8	8/8/0		25	КИ-8	3-ПК-1, У-ПК-1,

							В-ПК-1, 3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2
2	Раздел 2	9-15	7/7/0		25	КИ-15	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2
	<i>Итого за 6 Семестр</i>		15/15/0		50		
	Контрольные мероприятия за 6 Семестр				50	Э	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-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>6 Семестр</i>	15	15	0
1-8	Раздел 1	8	8	0

1	Электромагнитное мультипольное излучение Поля электрического и магнитного мультипольных моментов. Разложение поля мультиполя по плоским волнам. Электрический дипольный и квадрупольный моменты, магнито-дипольный момент. Приближение электрического диполя и квадруполя, магнитного диполя.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
2	Интенсивность поля излучения. Квантование поля излучения. Фотоны Квантование поля излучения. Переходы в атоме при его взаимодействии с электромагнитным полем. Фотоны. Операторы рождения и уничтожения фотона. Интенсивности поля в приближениях электрического диполя и квадруполя, магнитного диполя.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
3	Спонтанное излучение, вынужденное излучение и поглощение. Коэффициенты Эйнштейна Вероятности радиационных переходов. Спонтанное излучение, вынужденное излучение и поглощение. Коэффициенты Эйнштейна, связь между ними. Сечения излучения и поглощения.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
4	Оператор углового момента и спин электрона. Правила отбора Операторы угловых моментов. Сложение моментов. Матричные элементы. Спин электрона. Коэффициенты Клебша-Гордана, $3j$ -, $6j$ - и $9j$ -символы. Правила отбора для радиационных переходов по четности и по изменению углового момента.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
5	Атом водорода Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Уровни энергии, волновые функции. Правила отбора, разрешенные и запрещенные переходы. Тонкая структура атома водорода, обусловленная зависимостью массы электрона от скорости и его спином. Спектральные серии атома водорода без и с учетом тонкой структуры. Лэмбовский сдвиг. Водородоподобные ионы.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
6	Электронные конфигурации атомов с произвольным количеством электронов Решение уравнение Шредингера в приближении центрального поля. Электронная конфигурация. Принцип Паули, эквивалентные и неэквивалентные электроны. Четность состояний.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
7	Тонкая структура термов в приближениях LS-связи и jj-связи Термы атома с произвольным количеством электронов в случае L-S и jj- связи. Нахождение термов в случае эквивалентных и неэквивалентных электронов. Тонкая структура атома с произвольным количеством электронов, вероятности правила отбора для радиационных переходов в случае L-S и jj- связи	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0
8	Эффекты Штарка и Зеемана (часть 1) Расщепление уровней атома во внешнем электрическом поле. Квадратичный эффект Штарка. Зависимость расщепления спектральных линий от направления	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0

	наблюдения. σ и π компоненты, их частоты и интенсивности. Линейный эффект Штарка для водородоподобных уровней. Расщепление уровней атома в неоднородном и переменном полях. Расщепление уровней атома во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана. Фактор Ланде. Частоты σ и π компонент. Эффект Пашена-Бака в сильных полях.			
9-15	Раздел 2	7	7	0
9	Основы квантовой механической теории молекул Взаимодействие электронов и ядер при образовании молекул. Молекулярная волновая функция. Разделение энергии молекулы на электронную, колебательную и вращательную составляющие, их порядки величин.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
10	Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул Электронная, колебательная и вращательная энергии двухатомной молекулы. Разложение энергии состояний молекул в ряды по колебательным и вращательным квантовым числам. Классификация электронных термов двухатомной молекулы.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
11	Классификация излучательных переходов между различными состояниями в молекулах. Безызлучательные переходы Правила отбора для переходов между различными состояниями двухатомных молекул, интенсивности спектральных линий. Принцип и коэффициенты Франка-Кондона. Спектральные диапазоны излучательных переходов. Безызлучательная релаксация, преддиссоциация.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
12	Вращательные, колебательные и электронные спектры двухатомных молекул Вращательные, колебательно-вращательные и электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. P-, R- и Q- ветви вращательных и колебательно-вращательных излучательных переходов.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
13	Люминесценция и комбинационное рассеяние Люминесценция, спектры люминесценции, интенсивности спектральных линий, квантовый выход люминесценции. Комбинационное рассеяние света. Вращательные и колебательно-вращательные спектры комбинационного рассеяния, правила отбора	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
14	Энергетические состояния многоатомных молекул и переходы между ними Основы систематизации состояний многоатомных молекул. Равновесная конфигурация. Симметрия многоатомных молекул. Колебательные и вращательные степени свободы. Классификация энергетических состояний по вращательным степеням свободы.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
15	Группы вращений молекул и точечные группы Основы теории симметрии. Точечные группы. Группа молекулярной симметрии. Группы вращений. Классификация уровней энергии молекул по симметрии.	Всего аудиторных часов		
		1	1	0
		Онлайн		
		0	0	0

	Интенсивности переходов и правила отбора.			
--	---	--	--	--

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

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы дисциплины «Основы атомной и молекулярной спектроскопии» используются различные образовательные технологии – во время аудиторных занятий занятия проводятся в форме продвинутых лекций с использованием технических средств обучения - лекций с визуализацией.

Для контроля усвоения студентом разделов данного курса используется тестирование и устные опросы по лекционному материалу.

Самостоятельная работа студентов подразумевает под собой проработку лекционного материала с использованием рекомендуемой литературы для подготовки к тестам.

Часть занятий проводится в интерактивной форме.

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-1	З-ПК-1	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-1	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-1	Э, КИ-8, КИ-15
ПК-2	З-ПК-2	Э, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-2	Э, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-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. 53 Б 18 Квантовая механика : учебное пособие, Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2019
2. ЭИ Б 24 Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие, Санкт-Петербург: Лань, 2022

3. ЭИ Б 82 Лазеры: устройство и действие : , Санкт-Петербург: Лань, 2022
4. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная спектроскопия : , М. А. Ельяшевич, Москва: Либроком, 2009
5. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия : , М. А. Ельяшевич, Москва: Либроком, 2009

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 530 Л22 Теоретическая физика Т.3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория, , Москва: Физматлит, 2008
2. 537 3-43 Принципы лазеров : , О. Звелто, Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 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 курса “Основы атомной и молекулярной спектроскопии” необходимо основное внимание уделить изучению физических основ процесса излучения и поглощения электромагнитного поля атомами и молекулами, теории атомных и молекулярных спектров излучения и поглощения, рассмотрению основных положений систематизации энергетических состояний атомов и молекул.

Необходимо хорошо усвоить основные механизмы и критерии образования атомарных и молекулярных спектров излучения и поглощения, для чего обратить внимание на такие вопросы, как свойства электромагнитных полей, излучаемых атомарными и молекулярными квантовыми системами, основы систематики состояний атомов и молекул.

Критерием полноты усвоенного материала является умение классифицировать атомарные и молекулярные спектры излучения и поглощения, систематизировать состояния атомов и молекул. Для самопроверки в рамках самостоятельной работы следует уделить особое внимание решению задач вычисления вероятностей радиационных переходов в приближениях электрического диполя, электрического квадрупольного и магнитного диполя, расчетам термов электронных конфигураций в случае неэквивалентных и эквивалентных электронов в

приближениях LS и jj связи, расчетам электронных термов двухатомных и многоатомных молекул.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Прежде всего изучаются общие физические закономерности процессов излучения и поглощения электромагнитного поля атомами и молекулами – классическое электромагнитное поле квантуется, вводятся 3 излучательных процесса (спонтанное излучение, вынужденное излучение и поглощение), устанавливается связь между вероятностями этих процессов. Вводятся приближения электрического и магнитного диполей, электрического квадруполья и рассматриваются вопросы о соотношении интенсивностей излучения в каждом из этих приближений.

Второй раздел посвящен систематизации состояний атомов. Систематизация начинается с атома водорода. Необходимо рассмотреть различные виды взаимодействий (спин-орбитальное, электростатическое и др.), которые приводят к изменению (расщеплению) энергетических состояний и к появлению тонкой структуры. Затем делаются обобщения на случай атомов с произвольным количеством электронов. Особо внимание следует уделить вопросам правил отбора для радиационных переходов – правила отбора по изменению величины углового момента и по четности должны быть выведены, необходимо ввести понятия разрешенных и запрещенных переходов в различных приближениях. Также необходимо рассмотреть случаи помещения атома в электрическое (эффект Штарка) и магнитное (эффект Зеемана) поля.

При излучении раздела о систематике состояний двухатомных молекул необходимо подчеркнуть важность наличия у них различных степеней свободы, что приводит к возникновению колебательной и вращательной структуры в спектрах поглощения и излучения. Следует также обратить внимание студентов на то, что различия в интенсивностях спектральных линий обусловлены не только радиационными правилами отбора, но и вероятностными факторами (фактор Франка-Кондона).

При излучении вопросов, связанных с систематикой состояний многоатомных молекул, необходимо акцентировать внимание на вопросы симметрии – ряд важных выводов может быть сделан исходя из наличия у молекул тех или иных свойств симметрии.

Самостоятельная работа студентов необходима для выработки у них умения применения полученных теоретических знаний для решения практических задач, основными из которых являются: вычисление вероятностей радиационных переходов в приближениях электрического диполя, электрического квадруполья и магнитного диполя; расчеты термов электронных конфигураций в случае неэквивалентных и эквивалентных электронов в приближениях LS и jj связи; расчеты электронных термов двухатомных и многоатомных молекул.

Автор(ы):

Шнырев Сергей Львович, д.ф.-м.н., доцент

Рецензент(ы):

д.ф.-м.н., профессор Киреев С.В.