



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Физический факультет
Кафедра общей и экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ
Декан И.М. Буднев
«20» июня 2017 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Наименование дисциплины (модуля): - **Б1.В.ДВ.5 Атомная и молекулярная спектроскопия**

Направление подготовки: - **03.03.02 Физика**

Тип образовательной программы:- **академический бакалавриат**

Направленность (профиль) подготовки: - **физика конденсированного состояния**

Квалификация (степень) выпускника – **бакалавр**

Форма обучения - **очная**

Согласовано с УМК физического факультета.
Протокол № 8
от 19 июня 2017 г.

Зам. председателя УМК
В.В. Чумак

Рекомендовано кафедрой
общей и экспериментальной физики.
Протокол №12
от 13 июня 2017 г.

Зав. кафедрой

А.А. Гаврилюк

Иркутск 2017 г.

Содержание

| | | |
|-------------|--|-----------|
| 1 | Цели и задачи дисциплины (модуля) | 3 |
| 2 | Место дисциплины (модуля) в структуре ООП. | 3 |
| 3 | Требования к результатам освоения дисциплины (модуля) | 4 |
| 4 | Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы | 4 |
| 5 | Содержание дисциплины (модуля) | 5 |
| 5.1 | Содержание разделов и тем дисциплины (модуля) | 6 |
| 5.2 | Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями) | 6 |
| 5.3 | Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий | 7 |
| 6 | Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ. | 8 |
| 7 | Примерная тематика реферативных работ | 9 |
| 8 | Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля) : | 9 |
| | а) основная литература; | |
| | б) дополнительная литература; | |
| | в) программное обеспечение; | |
| | г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы | |
| 9 | Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля). | 9 |
| 10 | Образовательные технологии | 10 |
| 11 | Оценочные средства. (ОС). | 10 |
| 11.1 | Оценочные средства | 10 |
| 11.2 | Оценочные средства текущего контроля | 10 |
| 11.3 | Оценочные средства для промежуточной аттестации в форме зачета. | 10 |

Приложение: Фонд оценочных средств

1. Цели и задачи дисциплины

Целью курса является изучение основных понятий и физического содержания спектроскопических явлений атомов и молекул и применения этих знаний для анализа комплексных процессов трансформации световой энергии в веществе. Формирование у обучающихся определенного минимума начальных сведений по атомной и молекулярной спектроскопии, необходимого при подготовке физиков-исследователей, экспериментаторов, инженеров-физиков, инженеров промышленных предприятий для работы в области анализа и применения спектральных методов исследования.

Задачи дисциплины

Расширить объем знаний учащихся, касающихся принципов и методов спектроскопии и их приложений, полученных ранее из курса общей физики, дать представление о современном состоянии спектроскопии атомов и молекул, ее связи с другими научными дисциплинами и тенденциях развития.

Рассмотреть основные экспериментальные закономерности и теоретические представления спектроскопии, особенности применения знаний из области оптики, атомной физики, квантовой механики, физики твердого тела для анализа и описания наблюдаемых явлений.

Рассмотреть современные методы теоретической и прикладной спектроскопии, а также пути их развития и совершенствования.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Данный спецкурс напрямую связан с курсом оптики, квантовой механики и атомной физики. Дисциплина «атомная и молекулярная спектроскопия» входит в модуль **Б1.В.ДВ.5**, относящийся к вариативной части профессионального цикла основной образовательной программы по направлению: **03.03.02 Физика**. Данный спецкурс напрямую связан со спецкурсом по лазерной спектроскопии конденсированного состояния, с одной стороны являясь вводным курсом к этой дисциплине, а с другой стороны имеет самостоятельное значение для углубленного обобщенного изучения принципов и методов спектроскопии излучения атомов и молекул.

Для успешного усвоения курса атомной и молекулярной спектроскопии требуется знание курса оптики, квантовой механики и владение операциями математического анализа.

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

В результате изучения дисциплины студенты будут:

- **Знать:** основные разделы и методы спектроскопии атомов и молекул, иметь представление о современном состоянии дисциплины и о тенденциях развития.

- **Уметь:** применить спектроскопический метод и специализированное оборудование в соответствии с предложенной практической задачей.
- **Владеть:** первичными навыками работы со спектральным оборудованием.

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование **следующих компетенций:**

- способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (**ОПК-1**);

В результате усвоения дисциплины учащиеся должны обладать следующими **профессиональными компетенциями:**

- способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (**ПК-1**);
- способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (**ПК-2**).

4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы (разделяется по формам обучения)

| Вид учебной работы | Всего часов / зачетных единиц | Семестры | | | |
|---|-------------------------------|------------|---|---|---|
| | | 7 | - | - | - |
| Аудиторные занятия (всего) | 60/1,70 | 60/1,70 | - | - | - |
| В том числе: | - | - | - | - | - |
| Лекции | 18/0,5 | 18/0,5 | - | - | - |
| Практические занятия (ПЗ) | 36/1 | 36/1 | - | - | - |
| Коллоквиум | - | - | - | - | - |
| Лабораторные работы (ЛР) | - | - | - | - | - |
| Контроль самостоятельной работы (КСР) | 6/0,17 | 6/0,17 | - | - | - |
| Самостоятельная работа (всего) | 48/1,33 | 48/1,33 | - | - | - |
| В том числе: | - | - | - | - | - |
| Курсовой проект (работа) | - | - | - | - | - |
| Расчетно-графические работы | - | - | - | - | - |
| Реферат (при наличии) | 48/1,33 | 48/1,33 | - | - | - |
| <i>Домашние контрольные работы</i> | | | - | - | - |
| Вид аттестации зачет | | | - | - | - |
| Общая трудоемкость часы зачетные единицы | 108 | 108 | - | - | - |
| | 3 | 3 | - | - | - |

5. СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ

5.1 Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1. Спектры и структура атомов.

Атом водорода. Тонкая структура атома водорода. Уравнение Шредингера, волновые функции, уровни энергии. Оптические переходы, спектральные серии. Тонкая структура уровней энергии. Спин-орбитальное взаимодействие.

Тема 2. Спектры щелочных металлов.

Система уровней и спектры щелочных металлов. Сравнение с атомом водорода. Тонкая структура линий.

Тема 3. Многоэлектронные атомы.

Общий подход к описанию многоэлектронного атома. Основные приближения, модели. Характер зависимости энергии электрона от квантовых чисел n и l . Принцип Паули. Электронные слои и оболочки и их заполнение. Периодическая система элементов.

Тема 4. Эффект Зеемана.

Явление Зеемана в сильном поле для случая нормальной связи. Картина расщепления уровней, влияние спин-орбитального взаимодействия.

Тема 5. Эффект Штарка.

Спиновые состояния в многоэлектронных атомах. Определители Слэтера. Принцип Паули. Классификация состояний в многоэлектронных атомах. Суммирование моментов и спин-орбитальная связь. Связь Рассел-Саундерса и jj связь. Атомные термы. Построение спектра поглощения атома. Эффект Штарка.

Тема 6. Структура и спектры молекул.

Общая характеристика молекулярных спектров. Виды движения в молекулах. Приближенное представление полной энергии молекулы и его обоснование по Борну-Оппенгеймеру. Адиабатическое приближение. Потенциальная кривая двухатомной молекулы. Понятие об адиабатических потенциальных поверхностях. Вращательные спектры. Колебательно-вращательные спектры. Электронные спектры. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния

Тема 7. Метод молекулярных орбиталей.

Принцип метода молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Симметрия двухатомных молекул. Молекулярные термы. Виды химической связи (сигма-связь, пи-связь).

Тема 8. Спектральные приборы.

Устройство. Особенности конструкции. Источники излучения. Методы спектрального разложения излучения. Детекторы излучения. Сбор данных и обработка информации.

Тема 9. Методы спектроскопии.

Характеристика современных методов спектроскопии.

Тема 10. Флуоресцентная спектроскопия.

Флуоресцентная спектроскопия как метод анализа химического состава образца. Источники возбуждающего излучения.

Тема 11. Абсорбционная спектроскопия.

Спектр поглощения вещества. Экспериментальные особенности использования перестраиваемых лазеров в качестве источников излучения. Вращательная структура. Перестройка частоты

Тема 12. Лазерная спектроскопия.

Спектрально-люминесцентные свойства лазерных сред. Схема уровней. Оптическая накачка. Перестройка частоты. лазерная спектроскопия. Измерение размера и концентрации частиц, их формы, получение данных о температуре и давлении. Лидары.

Тема 13. Люминесценция.

Дефекты в твердых телах. Центры окраски. Методы окрашивания кристаллов. Центры окраски в ЩГК. Спектры поглощения и люминесценции. Механизм возникновения люминесценции. Рекомбинационные процессы. Классификация люминесценции.

Тема 14. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Двухфотонная спектроскопия. Неупругое рассеяние. «Стоксова» и «антистоксова» частота.

Тема 15. Фурье спектроскопия.

Преимущество метода перед традиционным разложением. Принцип построения Фурье спектрометра. Особенности обработки данных. Применение Фурье спектрометров.

Тема 16. Прикладная спектроскопия. Тенденции развития.

Обобщающие замечания. Измерение длин волн. Измерение интенсивностей линий. Методы повышения спектрального разрешения. Создание нового оборудования.

5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

| № п/п | Наименование обеспечиваемых дисциплин | № № тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых дисциплин (вписываются разработчиком) | | | | | | | | |
|-------|---|--|---------|---------|---------|---------|---------|---------|--|--|
| | | Тема 1 | Тема 2 | Тема 5 | Тема 9 | Тема 10 | Тема 12 | Тема 13 | | |
| 1. | Квантовая механика | Тема 1 | Тема 2 | Тема 5 | Тема 9 | Тема 10 | Тема 12 | Тема 13 | | |
| 2. | Оптика | Тема 1 | Тема 2 | Тема 7 | Тема 13 | | | | | |
| | Введение в физику конденсированного состояния | Тема 8 | Тема 11 | Тема 16 | | | | | | |

5.3. Разделы и темы дисциплин и виды занятий

| № п/п | Наименование раздела Наименование темы | Виды занятий в часах | | | | | | | Всего |
|-------|--|----------------------|------------|--------|-----------|----------|-----------|------------|-------|
| | | Лекц | Практ зан. | Семина | Лаб. зан. | КСР | СРС | | |
| 1 | Спектры и структура атомов | 2 | 2 | | | | 4 | 8 | |
| 2 | Спектры щелочных металлов | | 2 | | | | 2 | 4 | |
| 3 | Многоэлектронные атомы | | 2 | | | | 4 | 6 | |
| 4 | Эффект Зеемана | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 5 | Эффект Штарка | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 6 | Структура и спектры молекул | | 2 | | | | 4 | 6 | |
| 7 | Метод молекулярных орбиталей | | 4 | | | | 6 | 10 | |
| 8 | Спектральные приборы | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 9 | Методы спектроскопии | | 2 | | | 2 | 2 | 6 | |
| 10 | Флуоресцентная спектроскопия | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 11 | Абсорбционная спектроскопия | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 12 | Лазерная спектроскопия | 2 | 2 | | | | 2 | 6 | |
| 13 | Люминесценция | 2 | 2 | | | 2 | 4 | 10 | |
| 14 | Спектроскопия комбинационного рассеяния | | 3 | | | | 4 | 7 | |
| 15 | Фурье спектроскопия | | 3 | | | | 4 | 7 | |
| 16 | Прикладная спектроскопия. Тенденции развития | 2 | 2 | | | 2 | 2 | 8 | |
| | ИТОГО | 18 | 36 | | | 6 | 48 | 108 | |

6. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

| № п/п | № раздела и темы дисциплины (модуля) | Наименование семинаров, практических и лабораторных работ | Трудоемкость (часы) | Оценочные средства | Формируемые компетенции |
|-------|--------------------------------------|---|---------------------|--------------------|-----------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| 1 | Тема 1 | Методы абсорбционной спектроскопии в УФ и видимой областях. Спектрофотометрия. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |
| 2 | Тема 2 | Исследование оптических свойств кристаллических сред методом флуоресцентной спектроскопии. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |
| 3 | Тема 3 | Использование абсорбционной инфракрасной спектроскопии для анализа колебаний многоатомных молекул. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |
| 4 | Тема 4 | Спектроскопия Фурье. Анализ спектров многоатомных молекул. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |
| 5 | Тема 5 | Спектроскопия комбинационного рассеяния. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |
| 6 | Тема 6 | Оптические спектры поглощения твердых тел. Формула Смакулы – Декстера. Расчет концентрации поглощающих центров. | 6 | Реферат | (ОПК-1) (ПК-1) (ПК-2) |

6.1 План самостоятельной работы студентов

| № нед. | Тема | Вид самостоятельной работы | Задание | Рекомендуемая литература | Количество часов |
|--------|---------|----------------------------|---|---|------------------|
| 1-10 | Реферат | Внеаудиторная работа. | Изучение научной и специальной литературы, подготовка к занятиям, выполнение заданий по темам, вынесенным на самостоятельное изучение, конспектирование | Из списка основной и дополнительной литературы. | 48 |

| | | | | | |
|--|--|--|---------------------------------|--|--|
| | | | ответов на контрольные вопросы. | | |
|--|--|--|---------------------------------|--|--|

6.2 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Цель самостоятельной работы студента – осмысленно и самостоятельно работать сначала с учебным материалом, затем с научной информацией, заложить основы самоорганизации и самовоспитания с тем, чтобы привить умение в дальнейшем непрерывно повышать свою профессиональную квалификацию.

В учебном процессе выделяют два вида самостоятельной работы:

- аудиторная – самостоятельная работа выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.
- внеаудиторная – самостоятельная работа выполняется студентом по заданию преподавателя, но без его непосредственного участия.

Самостоятельная работа помогает студентам:

1) Овладеть знаниями:

- чтение текста (учебника, первоисточника, дополнительной литературы и т.д.);
- составление плана текста, графическое изображение структуры текста, конспектирование текста, выписки из текста и т.д.;
- работа со справочниками и другой справочной литературой;
- ознакомление с нормативными и правовыми документами;
- учебно – методическая и научно-исследовательская работа;
- использование компьютерной техники, Интернета и др.;

2) Закреплять и систематизировать знания:

- работа с конспектом лекций;
- обработка текста, повторная работа над учебным материалом учебника, первоисточника, дополнительной литературы, аудио и видеозаписей;
- подготовка плана;
- составление таблиц для систематизации учебного материала;
- подготовка ответов на контрольные вопросы;
- заполнение рабочей тетради;
- аналитическая обработка текста;
- подготовка мультимедиа презентации и докладов к выступлению на семинаре (конференции, круглом столе и т.п.);
- подготовка реферата;
- составление библиографии использованных источников;

- тестирование и др.;

3) Формировать умения:

- решение ситуационных задач и упражнений по образцу;
- выполнение расчетов (графические и расчетные работы);
- подготовка к контрольным работам;
- подготовка к тестированию;
- опытно-экспериментальная работа;

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

ОПК-1, ПК-1, ПК-2.

7. Примерная тематика реферативных работ.

1. Атомы и молекулы, как квантово-механические системы.
2. Атом водорода. Уравнение Шредингера для атома водорода. Магнитное квантовое число. Орбитальное квантовое число.
3. Представление атомных орбиталей. s- и p- орбитали в атоме водорода. Понятие гибридных орбиталей.
4. Спин и спин-орбитальное взаимодействие. Эффекты Зеемана, Пашена-Бака.
5. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока. Качественные результаты использования метода Хартри-Фока.
6. Связь Рассел-Саундерса и jj связь. Атомные термы. Построение спектра поглощения атома. Эффект Штарка.
7. Спектры молекул. Разделение движений в сложной молекуле: вращательное, колебательное, электронное. Принцип Борна-Оппенгеймера.
8. Метод молекулярных орбиталей (МО ЛКАО). Виды химической связи (сигма-связь, пи- связь).
9. Колебательные спектры молекул. Валентные и деформационные колебания.
10. Различия между спектрами ИК поглощения и спектрами комбинационного рассеяния.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

Основная

1. Раджабов Е.А. Спектроскопия атомов и молекул в конденсированных средах [Текст] : учеб. пособие / Е. А. Раджабов ; рец.: В. В. Акимов, А. А. Гаврилюк ; Иркутский гос. ун-т, Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т геохимии им. А. П. Виноградова. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2013. - 107 с. ; 20 см. -- ISBN 978-5-9624-0882-8 : 188.00 р.
2. Павлинский Г.В. Рентгеновская флуоресценция [Текст] : научное издание / Г. В. Павлинский ; рец.: Н. М. Буднев, А. Л. Финкельштейн ; Иркутский гос. ун-т, Физ. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2013. - 85 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 80-85. - ISBN 978-5-9624-0895-8 : 184.00 р., 184.00 р.
3. Сивухин Д.В. Общий курс физики : учеб. пособие для студ. физ. спец. вузов: в 5 т. / Д. В. Сивухин. - 3-е изд., стер. - М. : Физматлит. - 22 см. Т.4 : Оптика. - 2013. - 791 с. - Предм. указ.: с. 784-791. - ISBN 5-9221-0763-1 : 300.00 р.
4. Душутин Н.К. Теория излучения [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Н. К. Душутин, Ю. В. Ясюкевич ; Иркутский гос. ун-т, Науч. б-ка. - ЭВК. - Иркутск : ИГУ, 2008. - Режим доступа: Электронный читальный зал "Библиотех". - Неогранич. доступ. - (в кор.) : 50.00 р.

Дополнительная

1. В.А. Кизель. Практическая молекулярная спектроскопия. 1998
2. М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов. Колебания молекул. 1972.
4. К. Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. 1985.

5. В. Демтредер. Лазерная спектроскопия. 1985.
6. Г. Вальтер. Лазерная спектроскопия атомов и молекул. 1979.
7. У. Фано, Л. Фано. Физика атомов и молекул. 1980.
8. А. Смит. Прикладная ИК спектроскопия. 1982.
10. А. Барнес, У. Орвилл-Томас. Колебательная спектроскопия. Современные воззрения. Тенденции развития. 1981.
11. А. Андерсон. Применение спектров комбинационного рассеяния. 1977.

в) **программное обеспечение:** *не предусматривается*

г) **базы данных,** информационно-справочные и поисковые системы: интернет ресурсы в свободном доступе и на сайте ИГУ www.isu.ru и физического факультета ИГУ.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Оборудование: Макеты спектральных приборов. Образцы спектров реальных объектов. Элементы оптических конструкций.

Материалы: Ионные кристаллы, активированные ионные кристаллы, монокристаллы с центрами окраски.

10. Образовательные технологии:

При освоении дисциплины используются сочетания видов учебной работы с методами и формами активизации познавательной деятельности учащихся для достижения запланированных результатов обучения и формирования компетенций. На лекционных занятиях – дискуссии, индивидуальное обучение и обучение на основе опыта; на практических занятиях – дискуссия, работа в команде, индивидуальное обучение, обучение на основе опыта, исследовательский метод.

Для достижения поставленных целей преподавания дисциплины реализуются следующие средства, способы и организационные мероприятия:

- изучение теоретического материала дисциплины на лекциях
- самостоятельное изучение теоретического материала дисциплины с использованием Интернет-ресурсов, информационных баз, методических разработок, специальной учебной и научной литературы;
- закрепление теоретического материала при проведении практических занятий с использованием демонстрационного и наглядного (графического) материалов, специальной литературы, выполнение индивидуальных заданий.

11. Оценочные средства (ОС):

Фонд оценочных средств представлен в приложении к программе

11.1. Оценочные средства для входного контроля (могут быть в виде тестов с закрытыми или открытыми вопросами).

11.2. Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета (могут быть в виде тестов, ситуационных задач, деловых и ролевых игр, диспутов, тренингов и др.). Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность компетенций **ОПК-1, ПК-1, ПК-2.**

Перечень контрольных вопросов для самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа включает изучение лекционного материала с привлечением учебных пособий, подготовку к зачету, написание рефератов на заданную тему.

1. Спектры электромагнитного излучения.
2. Особенности структуры спектра атома, молекулы и макросистемы.
3. Спектроскопия как источник сведений о квантово-механических величинах и о строении атомов и молекул.
4. Строение атома и его энергетический спектр.
5. Приближение центрального поля. Типы связей.
6. Сверхтонкая структура.
7. Спектры молекул.
8. ИК спектры и спектры комбинационного рассеяния.
9. Природа и свойства энергетических уровней во внешних электрических и магнитных полях.
10. Уширение спектральных линий.
11. Спектральные приборы
12. Спектроскопические методы
13. Прикладная спектроскопия.

11.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации в форме зачета.

Примерный список вопросов к зачету

1. Атомы и молекулы как квантово-механические системы. Квантово-механические законы сохранения.
2. Сохранение энергии, сохранение импульса и уравнение Шредингера. Примеры: частица в потенциальной яме, гармонический осциллятор.
3. Момент импульса, оператор момента импульса. Правила коммутации. Собственные значения и собственные функции оператора проекции момента импульса.
4. Собственные значения квадрата момента импульса. Правило сложения моментов. Оператор спина. Собственные значения и собственные функции оператора спина.
5. Атом водорода. Уравнение Шредингера для атома водорода в сферических координатах. Разделение переменных, радиальное и угловое уравнения.
6. Магнитное квантовое число. Орбитальное квантовое число. Угловая часть волновых функций атома водорода.
7. Решение радиального уравнения Шредингера для атома водорода. Главное квантовое число. Радиальная часть волновой функции атома водорода.
8. Понятие состояния атома. Возможные комбинации волновых чисел. Классификация атомных состояний.
9. Понятие вырожденного состояния и кратность вырождения. Представление атомных орбиталей. s- и p- орбитали в атоме водорода. Понятие гибридных орбиталей.
10. Переходы между атомными состояниями. Теория возмущений для атомных переходов.
11. Матричные элементы переходов. Правила отбора по орбитальному и магнитному квантовому числу в атоме водорода. Дипольное и магнитно-дипольное приближение.
12. Спин и понятие спин-орбитального взаимодействия. Оператор спин-орбитального взаимодействия. Правила отбора по спину.
13. Тонкое расщепление уровней. Эффект Зеемана.
14. Многоэлектронные атомы. Приближение самосогласованного поля.
15. Метод Хартри-Фока для одноэлектронных волновых функций. Кулоновский интеграл и обменный интеграл. Качественные результаты использования метода Хартри-Фока.
16. Спиновые состояния в многоэлектронных атомах. Определители Слэтера. Принцип Паули. 17. Классификация состояний в многоэлектронных атомах. Суммирование моментов и спин-орбитальная связь.
18. Связь Рассел-Саундерса и jj связь. Атомные термы. Построение спектра поглощения атома.
19. Эффект Штарка.
20. Спектры молекул. Разделение движений в сложной молекуле: вращательное, колебательное, электронное.
21. Принцип Борна-Оппенгеймера. Гамильтониан сложной молекулы.

- 22.. Молекула водорода. Метод валентных связей (Гайтлера-Лондона). Электронные волновые функции в молекуле водорода.
22. Связывающее и антисвязывающее состояние. Диссоциация молекулы.
23. Принцип метода молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО).
24. Симметрия двухатомных молекул. Молекулярные термы. Виды химической связи (сигма-связь, пи-связь).
25. Колебательные спектры молекул. Взаимодействие колебаний с вращениями.
26. Колебательные уровни двухатомной молекулы. Анггармонизм колебаний. Потенциал Морзе. Кубический анггармонический потенциал.
27. Колебательные спектры многоатомных молекул. Понятие нормальных координат. Правила отбора в спектрах поглощения.
28. Вращательная структура колебательных уровней. PQR-анггармонизм.
29. Валентные и деформационные колебания.
- 30.. Инфракрасное поглощение.
31. Комбинационное (рамановское) рассеяние света. Различия между спектрами поглощения и спектрами комбинационного рассеяния.

Разработчик:



к. ф.-м.н., доцент Н.Т.Максимова

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и экспериментальной физики
«_13_» июня 2017 г.

Протокол № 12

Зав.кафедрой



д.ф.-м.н. Гаврилюк А.А.