

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра квантовой электроники**

академик РАН



УТВЕРЖДАЮ

Декан ФФ

А. Е. Бондарь

10 2020 г.

Рабочая программа дисциплины
АТОМНАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
Направление подготовки 03.04.02 Физика Курс 1, семестр 1
Направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения **Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)					Промежуточная аттестация (в часах)			
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	20	12		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часа - в интерактивных формах 12 часов										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:
д.ф.-м.н. ст. преподаватель каф. КвЭл ФФ НГУ

А.И. Чичинин А.И. Чичинин

Заведующий кафедрой КвЭл ФФ НГУ
академик РАН

С.Н. Багаев С.Н. Багаев

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И.Б. Логашенко И.Б. Логашенко

Новосибирск 2020

Содержание

Аннотация	3
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	5
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем ..	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	7
5. Перечень учебной литературы.	10
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	11
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	11
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	11
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	12
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	12

Аннотация

к рабочей программе дисциплины «Атомная и молекулярная спектроскопия»

Направление: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика

Программа курса «Атомная и молекулярная спектроскопия» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.02 Физика, Общая и фундаментальная физика**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой квантовой электроники в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами первого курса физического факультета в осеннем семестре.

Цель курса – создание у студентов целостной картины строения атомов и молекул, их поведения при взаимодействии с различными видами излучений, обучение слушателей теоретическим основам атомной и молекулярной спектроскопии, получение ими практических навыков использования полученных знаний, умение интерпретировать типичные УФ- и ИК-спектры.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника профессиональных компетенций:

ПК-1 – способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: основные принципы и понятия оптической атомной и молекулярной спектроскопии, стандартные и современные методы спектроскопии и их возможности, возможности, методы и системы компьютерных технологий для физических теоретических и экспериментальных исследований в данной области, математический аппарат описания атомных спектров, теорию групп применительно к молекулярной спектроскопии, базовые понятия и отличия спектроскопии атомных, двухатомных и нелинейных молекул;

Уметь: самостоятельно ставить и решать конкретные физические задачи научных исследований в области атомной и молекулярной спектроскопии и применять полученные знания для описания молекулярных спектров и процессов динамики фотораспада молекул с использованием современной аппаратуры и компьютерных технологий, для решения задач и чтения оригинальных статей в области атомной и молекулярной спектроскопии;

Владеть: навыками постановки и решения задач научных исследований в области атомной и молекулярной спектроскопии, методами интерпретации типичных УФ- и ИК-спектров с помощью современных методов и средств теоретических и экспериментальных исследований, базовыми принципами теории вероятностных переходов.

Курс рассчитан на один семестр (1-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студентов, консультации, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: домашние задания, контрольные работы.

Промежуточная аттестация: – экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетных единицы.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Дисциплина «Атомная и молекулярная спектроскопия» представляет собой курс, предназначенный для обучения студентов-физиков, специализирующихся в области квантовой электроники (лазерной физики). В результате освоения курса у студентов должно сформироваться представление о фундаментальных принципах, на которых базируется эта дисциплина, рассматриваются общие вопросы спектроскопии, вопросы атомной спектроскопии и вопросы молекулярной спектроскопии. Современное учение о спектрах электромагнитного излучения базируется на квантовой теории. Определяется взаимосвязь данного курса с другими курсами, изучаемыми магистрантами кафедры квантовой электроники.

Цели курса – создание у студентов целостной картины строения атомов и молекул, их поведения при взаимодействии с различными видами излучений, обучение слушателей теоретическим основам атомной и молекулярной спектроскопии, получение ими практических навыков использования полученных знаний, умение интерпретировать типичные УФ- и ИК-спектры.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника профессиональных компетенций:

ПК-1 – способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать

- основные принципы и понятия оптической молекулярной спектроскопии, стандартные и современные методы спектроскопии и их возможности, возможности, методы и системы компьютерных технологий для физических теоретических и экспериментальных исследований в данной области (ПК-1.1)
- математический аппарат описания атомных спектров, теорию групп применительно к молекулярной спектроскопии, базовые понятия о отличия спектроскопии атомных, двухатомных и нелинейных молекул (ПК-2.1)

уметь

- самостоятельно ставить и решать конкретные физические задачи научных исследований в области атомной и молекулярной спектроскопии и применять эти принципы и понятия для описания молекулярных спектров и процессов динамики фотораспада молекул с использованием современной аппаратуры и компьютерных технологий (ПК 1.2)
- уметь применять полученные знания при решении задач и чтении оригинальных статей в области атомной и молекулярной спектроскопии (ПК-2.2)

владеть

- навыками постановки и решения задач научных исследований в области атомной и молекулярной спектроскопии, методами интерпретации типичных УФ- и ИК-спектров с помощью современных методов и средств теоретических и экспериментальных исследований (ПК-1.3)

- базовыми принципами теории вероятностных переходов, классификацию электронных состояний двухатомных молекул, принцип Франк-Кондона, принцип отражения Кондона для переходов в отталкивательное состояние, основные законы, описывающие вращательный и колебательный спектры (ПК-2.3)

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина реализуется в осеннем семестре 1-го курса магистратуры для студентов, обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой квантовой электроники.

Для успешного освоения курса студенты должны владеть базовыми знаниями по механике, электродинамике, оптике и нерелятивистской квантовой механике. Из математических дисциплин необходимо знание основ линейной алгебры, математического анализа, теории функции комплексных переменных и теории групп. Курс также предполагает достаточно глубокое знание студентами основ квантовой механики молекул.

Он предшествует выполнению квалификационной работы студента по данной специализации, так как дает ему необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения научных исследований в рамках подготовки его квалификационной работы.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	20	12		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов - в интерактивных формах 12 часов										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студентов и ее контроль преподавателями с помощью заданий, консультации, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: домашние задания, контрольные работы.

Промежуточная аттестация: – экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 72 часа, 2 зачетных единицы:

- Занятия лекционного типа – 20 часов;
- Практические занятия – 12 часов;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов.
- промежуточная аттестация (самостоятельная подготовка, консультация, экзамен) – 22 часа;

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, консультация, экзамен) составляет 36 часов.

Работа с обучающимися в интерактивных формах (практические занятия) составляет 12 часов.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Групповая консультация (часов)	Промежуточная аттестация (экзамен)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	Сам. работа во время промежуточной аттестации		
				Лекции	Практические занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Вероятности однофотонных переходов	1	3	2		1			
2	Фотонные состояния непрерывного спектра.	2	3	1	1	1			
3	Атомные термы	3	3	2		1			
4	Неприводимые тензорные операторы.	4	3	2		1			
5	Точно решаемые задачи атомной спектроскопии.	5	3	1	1	1			
6	<i>Контрольная работа по атомам</i>	6	3		2	1			
7	Электронные конфигурации и термы двухатомных молекул. <i>Разбор результатов контрольной работы</i>	7	3	1	1	1			
8	Задача о распаде двухатомной молекулы.	8	3	1	1	1			
9	Линейная молекула:	9	3	1	1	1			
10	Вращательный спектр.	10	3	1	1	1			
11	<i>Контрольная работа</i>	11	3		2	1			

	<i>по двухатомным молекулам</i>								
12	Теория групп в молекулярной спектроскопии <i>Разбор результатов контрольной работы по двухатомным молекулам</i>	12	3	1	1	1			
13	Спектроскопия нелинейных молекул <i>Разбор результатов контрольных работ и домашних заданий.</i>	13-15	14	7	1	6			
14	Групповая консультация		2					2	
15	Самостоятельная подготовка к экзамену		18				18		
16	Экзамен		2						2
ВСЕГО			72	20	12	18	18	2	2

Программа и основное содержание лекций (20 часов)

1. Вероятности однофотонных переходов. (2 часа)

«Золотое правило» Ферми для вероятности однофотонных переходов между дискретными уровнями и для переходов в непрерывный спектр. Вывод формулы для сечения поглощения. Электро- и магнитно-, дипольные и квадрупольные переходы. Уширения Лоренца, Допплера и Войта

2. Фотонные состояния непрерывного спектра. (1 час)

Вероятность спонтанного распада. Коэффициенты Эйнштейна и спектр излучения черного тела. Угловое распределение фотопродуктов.

3. Атомные термы. (2 часа)

Конфигурации и энергии атомных термов. L-S-связь, тонкая структура термов. Инверсионная и перестановочная четности. Общий метод нахождения термов заданной атомной конфигурации.

4. Неприводимые тензорные операторы. (2 часа)

Нахождение матричных элементов и построение гамильтонианов для этих операторов. Теорема Вигнера-Эккарта, правило сумм по магнитным числам, примеры вычислений матричных элементов. Правила отбора для оптических переходов.

5. Точно решаемые задачи атомной спектроскопии. (1 час)

Правила отбора: строгие, в приближениях LS-связи и одноконфигурационном приближении. Интенсивности мультиплетов. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашена-Бака в атомах

6. Электронные конфигурации и термы двухатомных молекул. (1 час)

Приближение Борна-Оппенгеймера. Разделение электронных и ядерных движений. Электронные, колебательные и вращательные состояния и волновые функции. Центробежное растяжение. Случаи Гунда a, b, c. Ридберговские и валентные состояния. Классификация электронных состояний двухатомных молекул на примере H₂ и HCl.

7. Задача о распаде двухатомной молекулы. (1 час)

Корреляция между молекулярными и атомными состояниями: по симметрии молекулярных состояний по проекциям на межатомную ось. Правило о не пересечении термов с одинаковой симметрией. Адиабатическое расщепление, неадиабатические переходы, формула Ландау-Зинера.

8. Линейная молекула. (1 час)

Энергетические уровни и волновые функции. От чего зависит и как вычисляется вероятность перехода в двухатомной молекуле для электронных, колебательных и вращательных спектров. Принцип Франк-Кондона. Принцип отражения Кондона для переходов в отталкивательное состояние.

9. Вращательный спектр. (1 час)

Колебательный вращательный момент. Интенсивности вращательных линий, вывод факторов Хенля-Лондона. Условия существования Q-ветви. Населенности вращательных уровней, их температурная зависимость, влияние ядерной статистики.

10. Теория групп в молекулярной спектроскопии. (1 час)

Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей (Гиллеспи). Основные положения теории групп. Основные точечные группы. Нахождение симметрии векторов дипольного и углового момента, квадрупольного тензора, атомных и молекулярных орбиталей. Изоморфизм групп пространственной симметрии и групп перестановок +инверсия.

11. Спектроскопия нелинейных молекул. (7 часов)

Нелинейные молекулы: колебательные структуры электронных и колебательных переходов. Классификация колебаний по видам (валентные, деформационные, симметричные, асимметричные) и по группам пространственной симметрии. Характерные группировки и частоты. Ангармоничность колебаний.

Интенсивности ИК-спектра, правила сумм для ИК интенсивностей. Взаимодействие вращений и колебаний. Инверсионный барьер. Резонанс Ферми, классический и квантовый. Эффект Реннера в вырожденных состояниях линейных молекул. Многофотонная диссоциация.

Вращательные структуры электронных и колебательных переходов. Сферический волчок, симметричный волчок, асимметричный волчок. Связь различных моментов. Волновые функции и энергетические уровни. Вращательная структура электронных и колебательных спектров (O-, P-, Q-, R-, S-) -ветви, центробежное растяжение многоатомных молекул.

Поверхности потенциальной энергии многоатомных молекул. Классификация электронных состояний по группам точечной симметрии. Корреляционные диаграммы для распада возбужденных нелинейных молекул. Корреляции: учет симметрии, спина и спин-орбитального взаимодействия. Колебательная структура электронных спектров.

Комбинационное рассеяние света. Простая классическая интерпретация. Интенсивности спектра КР: абсолютная, стоксова и антистоксова. Деполяризация КР. Правила сумм для СКР интенсивностей. Поляризуемость молекул. Механизм и применение поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии. Поляризация люминесценции.

Программа практических занятий (16 часов)

1. Фотонные состояния непрерывного спектра. Вероятность спонтанного распада. (1 час)

2. Точно решаемые задачи атомной спектроскопии. Интенсивности мультиплетов. (1 час)
3. Контрольная работа (2 часа)
4. Электронные, колебательные и вращательные состояния и волновые функции двухатомных молекул. (1 час)
5. Линейная молекула: энергетические уровни и волновые функции. Принцип Франк-Кондона. (1 час)
6. Интенсивности вращательных линий, факторы Хенля-Лондона. Населенности вращательных уровней, их температурная зависимость, влияние ядерной статистики. (1 час)
7. Нахождение симметрии векторов дипольного и углового момента, квадрупольного тензора, атомных и молекулярных орбиталей. (1 час)
8. Контрольная работа (2 часа)
9. Нелинейные молекулы: колебательные структуры электронных и колебательных переходов. Классификация колебаний (валентные, деформационные, симметр., асимметр.) и по группам пространственной симметрии. (1 час)
10. Вращательные структуры электронных и колебательных переходов. Сферический волчок, симметричный волчок, асимметричный волчок. Связь различных моментов. Волновые функции и энергетические уровни. Вращательная структура электронных и колебательных спектров. O-, P-, Q-, R-, S- ветви. (1 час)

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Решение домашних заданий, подготовка к практическим занятиям	12
Изучение материала лекций	6
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература:

1. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная спектроскопия [at/17926645](#)
Автор: М. А. Ельяшевич Издательство: Либроком Год: 2012

5.2. Дополнительная литература:

2. Ю. А. Пентин и Г. М. Курамшина, «Основы молекулярной спектроскопии», М: Мир, 2008.
3. В.А.Артамонов и Ю.Л.Словохотов "Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии", М., Академия, 2005.
4. Ф. Банкер, "Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия", М.: Мир, 1981.
5. Г. Герцберг, "Спектры и строение простых свободных радикалов", М., Мир, 1974.
6. Н. А. Поклонский, "Точечные группы симметрии", М., МГУ, 2003.
7. П. В. Елютин, "Теоретические основы квантовой радиофизики", МГУ, М, 2010.
8. П. В. Елютин и В. Д. Кривченков, "Квантовая механика с задачами", Физматлит, М, 2001.
9. Г. Герцберг, "Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул", ИИЛ, 1949.
10. К. Бенуэлл, "Основы молекулярной спектроскопии", М., Мир, 1985.
11. Л. А. Вайнштейн, "Атомная спектроскопия спектры атомов и ионов", МФТИ, Москва, 1991.

12. Г. Герцберг, "Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул", ИИЛ, 1949.
13. Г. Герцберг, "Спектры и строение двухатомных молекул. Двухатомные молекулы", ИИЛ, 1949.
14. Г. Герцберг, "Электронные спектры и строение многоатомных молекул", ИИЛ, 1969.
15. И. И. Собельман, "Введение в теорию атомных спектров", М. ГИФМЛ, 1963.
16. А. А. Мальцев, "Молекулярная спектроскопия", М., МГУ, 1980.
17. В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев, Ростов-наДону, "Теория строения молекул", 1997.
18. С. Э. Фриш, "Оптические спектры атомов", М., ГИФМЛ, 1963.
19. В. А. Кизель, "Практическая молекулярная спектроскопия", М., МФТИ, 1998.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Находится в свободном доступе на сайте <http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/rspectroscopy.htm>

20. P. W. Atkins, R. S. Friedman, "Molecular Quantum Mechanics", Oxford, 2005
21. W. S. Struve, "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Wiley, New York, 1989.
22. L. J. Curtis, "Atomic Structure and Lifetimes. A Conceptual Approach", London, 2003.
23. H. Lefebvre-Brion, R. W. Field, "The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules: Revised and Enlarged Edition " 2004.
24. A. K. Pradhan, S. N. Nahar, "Atomic Astrophysics and Spectroscopy", Cambridge, 2011.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MSOffice.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем проверки домашних заданий, которая проходит в форме беседы с преподавателем в специально отведенное время (прием заданий). Необходимо сдать все задачи из Задания. Студентам также необходимо выполнить 2 контрольные работы по пройденному материалу.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области атомной и молекулярной спектроскопии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию в устной форме.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Атомная и молекулярная спектроскопия».

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1 ПК 2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2 ПК 2.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.3 ПК 2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Домашнее задание № 1 (срок сдачи до 20 ноября)

- 1) Какие термы возможны, а какие – нет: $^{10}D_{6,5}$, 5S_1 , $^2D_{7/2}$, 0P_1 , $Cl \Pi (^2P_{1/2})$, $^1P^o$?
- 2) Какие термы возможны для двух эквивалентных d -электронов и одного p -электрона (конфигурация $nd^2 n'p^1$)?

3) Используя таблицы Вейла, выяснить, какие возможны термы с максимальным орбитальным моментом и со спином $S=1/2$, если электронная конфигурация f^5 .

4) Доказать, что $\langle j_1 \| \mathbf{j} \| j_1' \rangle = \delta_{j_1 j_1'} \sqrt{j(j+1)(2j+1)}$. То есть найти приведенный матричный элемент для оператора момента J .

5) Как изменится спектр поглощения атома водорода вблизи перехода $1s^1[{}^2S] \rightarrow 2p^1[{}^2P]$, если включить внешнее постоянное электрическое поле E , а излучение спектрометра:

а) неполяризовано, б) поляризовано вдоль E , в) поляризовано перпендикулярно E ?

Смещения в спектре линейны по $|E|$? Состояния с $n > 2$ не учитывать.

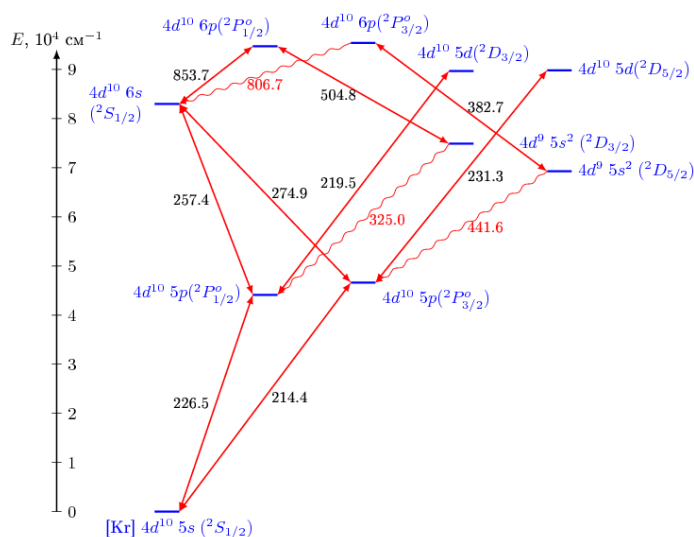
6) Как изменяется частота перехода между состояниями ${}^1S-{}^1D$ в ряду N^+ , O , F^+ ? Пусть частоты этих трех переходов известны и равны ω_N , ω_O и ω_F . Найти отношение времен спонтанного распада возбужденного состояния 1S для этих трех атомов. Переходы ${}^1S-{}^3P$ не учитывать.

Домашнее задание № 2 (срок сдачи до 30 декабря)

7) В атоме лития основное состояние X : ${}^2S_{1/2}$, а первые два возбужденных, A_1 и A_2 :

${}^2P_{1/2}$ и ${}^2P_{3/2}$, частоты перехода в которые равны ω_1 и ω_2 , соответственно. Найти отношения: а) сечений поглощения $\sigma_{X \rightarrow A_1}$ и $\sigma_{X \rightarrow A_2}$, б) интенсивностей линий испускания $I_{A_1 \rightarrow X}$ и $I_{A_2 \rightarrow X}$, в) времен жизни возбужденных состояний $\tau_{A_1 \rightarrow X}$ и $\tau_{A_2 \rightarrow X}$,

Для спонтанных распадов $A_1, A_2 \rightarrow X$ населенности возбужденных состояний считать равными.



8) Вывести выражение для g-фактора Ландэ, используя теорему Вигнера-Экарта.

9) На рисунке изображены термы иона Cd^+ . В приближении LS-связи найти относительные интенсивности шести вынужденных E₁-переходов из возбужденных состояний $4d^{10}5p[{}^2P_{1/2}^o]$ и $4d^{10}5p[{}^2P_{3/2}^o]$ в вышележащие состояния $4d^{10}6s[{}^2S_{1/2}]$, $4d^95s^2[{}^2D_{3/2}]$ и $4d^95s^2[{}^2D_{5/2}]$.

Населенности исходных двух состояний считать равными. Радиальные интегралы $\langle R'(r) | r | R(r) \rangle$ считать равными для всех шести переходов. (Это совершенно неверно, но нам сейчас это неважно.)

10) Найти относительные интенсивности спонтанных M1-переходов $n, S, L, J \rightarrow n', S', L', J'$ в приближении LS-связи. Частота перехода равна ω .

11) Два электронных состояния двухатомной молекулы имеют равные силовые постоянные, но их равновесные расстояния отличаются на величину ΔR . Найти выражение для факторов

Франка-Кондона $S_{v'0}^2$ для $v=0, 1$ и 2 как функцию ΔR . При каких значениях ΔR переход $0 \rightarrow 1$ сильнее переходов $0 \rightarrow 0$ и $0 \rightarrow 2$?

12) Спектр поглощения молекул FCl имеет пик в районе 330 нм. Каков выход возбужденных атомов F^* ? Чему равен β -параметр для $F^* = F(^2P_{1/2})$? для $F = F(^2P_{3/2})$?

14) Найти однократно возбужденные связанные состояния молекулы Ne_2 , из которых возможен электродипольный переход в основное (несвязанное) состояние? (На переходах такого типа работают эксимерные лазеры.)

15) Используя метод Гиллеспи, найти геометрическую и электронную структуру молекул HF, BeCl₂, SO₂, OF₂, I₃⁻, CO₃²⁻, PCl₃, PO₄³⁻, SF₄, PCl₅, и XeF₆. Указать их точечную группу симметрии.

16) Имеется молекула метана CH₄ (Группа симметрии T_d). Как преобразуются 5 представлений этой группы при понижении симметрии до C_{2v}?

17) Используя общий подход, найти симметрии всех колебаний молекулы SF₆. Указать, какие из них полносимметричны, сколько раз они вырождены, какие из них валентные, а какие – деформационные.

Пример контрольной работы по двухатомным молекулам.

- 1) Какие термы возможны, а какие --- нет: $^2\Pi^+$, $^4\Sigma_u^+$, $^2\Delta_2$, $^2\Pi_{5/2}$?
- 2) Какие молекулярные состояния получатся при сближении атомов $F(^2P) + Cl(^2D)$?
- 3) Нижние 5 возбужденных состояний линейной HOCl молекулы (в порядке возрастающей энергии): $(\pi^{*4}; ^1\Sigma^+)$, $(\pi^{*3}, \sigma^*; ^3\Pi)$, $(\pi^{*3}, \sigma^*; ^1\Pi)$, $(\pi^{*2}, \sigma^{*2}; ^3\Sigma^-)$, $(\pi^{*2}, \sigma^{*2}; ^1\Delta)$.

Молекула распадается на $OH(^2\Pi_{3/2,1/2}) + Cl(^2P_{3/2,1/2})$. С какими спин-орбитальными состояниями продуктов коррелируют эти 5 возбужденных состояний?

Учесть, что $\Delta E(^2\Pi_{1/2} - ^2\Pi_{3/2}) < \Delta E(^2P_{1/2} - ^2P_{3/2})$.

- 4) Найти вращательную постоянную B и наиболее вероятное вращательное число J в молекуле HCl при температуре $T=300$ К, если межъядерное расстояние равно 1.27×10^{-10} м.

Пример билета к экзамену

1. Теорема Вигнера-Эккарта. Правила отбора для E1, E2, M1- переходов между в атомах. Оптический электрон. Нарушение одноконфигурационного приближения. Правила отбора в случае нарушения L-S связи.
2. Теорема Вигнера-Эккарта и третье правило вычисления матричных элементов. Электродипольные переходы между мультиплетами в атоме: относительные интенсивности мультиплетов.

Форма экзаменационного билета представлена на рисунке

<p style="text-align: center;">МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p style="text-align: center;"><i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования</i></p> <p style="text-align: center;">«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» <i>(Новосибирский государственный университет, НГУ)</i></p> <p style="text-align: center;">Физический факультет</p>
<p style="text-align: center;">ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p> <p>1. _____ 2. _____</p> <p>Составитель _____ /Ф.И.О. преподавателя/ (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 ____ г.</p>

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

