

**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**



**Рабочая программа дисциплины
АТОМНАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

Направление подготовки **03.04.02 Физика**

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	Дифференциро- ванный 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										
Компетенции ПК-1										

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И.Б. Логащенко

Новосибирск, 2026

Содержание

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

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 обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	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

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		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.

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

Трудоёмкость дисциплины составляет: 2 зачётные единицы, 72 часа.

Форма промежуточной аттестации: 1 семестр – экзамен.

№		Вид деятельности	Семестр
			1
1		Лекции, ч	20
2		Практические занятия, ч	12
3		Лабораторные занятия, ч	-
4		Занятия в контактной форме, ч из них	36
5		аудиторных занятий, ч	32
6		в электронной форме, ч	-
7		консультаций, час.	2
8		промежуточная аттестация, ч	2
9		Самостоятельная работа, час.	36
10		Всего, ч	72

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

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-Экарта, 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 H_2 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.

1. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная спектроскопия /17926645 Автор: М. А. Ельяшевич Издательство: Либроком Год: 2007, ISBN 978-5-484-00886-5 (10 экз.)
2. Ю. А. Пентин и Г. М. Курамшина, «Основы молекулярной спектроскопии», М: Мир, 2008., ISBN 978-5-03-003846-9 ISBN 978-5-94774-765-2 (3 экз.)
3. В.А.Артамонов и Ю.Л.Словохотов "Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии", М., Академия, 2005., ISBN 5-7695-2137-6 (1 экз.)
4. Ф. Банкер, "Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия", М.: Мир, 1981.(4 экз.)
5. П. В. Елютин и В. Д. Кривченков, "Квантовая механика с задачами", Физматлит, М, 2001., ISBN 5-9221-0077-7 (3 экз.)
6. К. Бенуэлл, "Основы молекулярной спектроскопии", М., Мир, 1985.(4 экз.)
7. И. И. Собельман, "Введение в теорию атомных спектров", М. ГИФМЛ, 1963.(4 экз.)
8. А. А. Мальцев, "Молекулярная спектроскопия", М., МГУ, 1980. (2 экз.)
9. В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев, Ростов-наДону, "Теория строения молекул", 1997. (1 экз.)
10. С. Э. Фриш, "Оптические спектры атомов", М., ГИФМЛ, 1963.(3 экз.)
11. В. А. Кизель, "Практическая молекулярная спектроскопия", М., МФТИ, 1998., ISBN 5-89155-028-8 (1 экз.)

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

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

12. P. W. Atkins, R. S. Friedman, "Molecular Quantum Mechanics", Oxford, 2005
13. W. S. Struve, "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Wiley, New York, 1989.
14. L. J. Curtis, "Atomic Structure and Lifetimes. A Conceptual Approach", London, 2003.
15. H. Lefebvre-Brion, R. W. Field, "The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules: Revised and Enlarged Edition " 2004.
16. 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 заявленная компетенция ПК-1 сформирована 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.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	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.	Прием заданий, проведение контрольных работ, экзамен.
ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	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.	Прием заданий, проведение контрольных работ, экзамен.

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

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<u>Сдача заданий:</u> выполнено и сдано не менее 90% задач в течение семестра <u>Экзамен:</u> - дан развернутый ответ на вопросы билета и оценка на письменной части экзамена (или средняя оценка за две потоковые контрольные работы) не ниже «хорошо», – точность и корректность применения терминов и понятий; - умение делать выводы и обобщения, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины.	Отлично

В ответах на вопросы обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.	
<u>Сдача заданий:</u> выполнено и сдано не менее 80% задач в течение семестра <u>Экзамен:</u> - дан правильный ответ на вопросы билета и оценка на письменной части экзамена (или средняя оценка за две потоковые контрольные работы) не ниже «удовлетворительно», – наличие правильных ответов на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. В ответах на вопросы обучающийся мог допустить незначительные ошибки.	<i>Хорошо</i>
<u>Сдача заданий:</u> выполнено и сдано не менее 70% задач в течение семестра <u>Экзамен:</u> - дан правильный ответ на один вопрос билета и оценка на письменной части экзамена (или хотя бы одна из двух оценок за потоковые контрольные работы) не ниже «удовлетворительно», – наличие правильных ответов на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины.	<i>Удовлетворительно</i>
<u>Сдача заданий:</u> сдано менее 60% задач в течение семестра <u>Экзамен:</u> - не даны правильные ответы на вопросы билета и оценка на письменной части экзамена «неудовлетворительно», – не отвечает на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины.	<i>Неудовлетворительно</i>

10.3 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 , $Cl\ II (^2P_{1/2})$, $^1P^o$?
- 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 $\langle j_1 \| \mathbf{j} \| j_1 \rangle = \delta_{j,j'} \sqrt{j(j+1)(2j+1)}$. 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

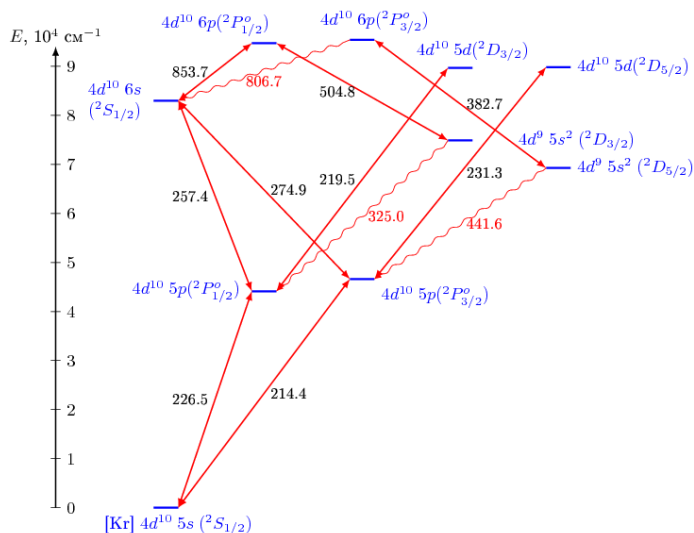
испускания $I_{A_1 \rightarrow X}$ и $I_{A_2 \rightarrow X}$, в) времен жизни

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 E_1 -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 He_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, $BeCl_2$, SO_2 , OF_2 , I_3^- , CO_3^{2-} , PCl_3 , PO_4^{3-} , SF_4 , PCl_5 , и XeF_6 . Указать их точечную группу симметрии.

16) Имеется молекула метана CH_4 (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 SF_6 . 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 $F(^2P) + \text{Cl}(^2D)$?
- 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 $\text{OH}(^2\Pi_{3/2,1/2}) + \text{Cl}(^2P_{3/2,1/2})$. 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 $T=300\text{ K}$, если межъядерное расстояние равно $1.27 \times 10^{-10}\text{ м}$.

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 мультиплетам в атоме: относительные интенсивности мультиплетов.

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.