

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 общей физики



Рабочая программа дисциплины

ФИЗИКА И ХИМИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

Направление подготовки: **03.03.02 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	Консультации в период занятий	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
7	144	32	32			56	18	4			2
Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул»: всего 144 часов/ 4 зачетные единицы из них: - контактная работа 70 часов Компетенции: ОПК-1											

Ответственный за образовательную программу

д.ф.-м.н., проф.

С. В. Цыбуля

Новосибирск, 2022

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 (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	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.	13
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	13
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	14
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	14
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	14
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	14

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

Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул» имеет своей целью дать студентам целостное представление о строении и взаимодействии атомов и молекул, образовании химических связей, научить студентов анализировать и решать базовые задачи атомной и молекулярной физики, сформировать общепрофессиональные навыки физика-исследователя. Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул» призвана дать четкие ориентиры физику-исследователю в обширном информационном потоке современности о многообразных создаваемых веществах.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общепрофессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>ОПК-1 -Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности, в том числе в сфере педагогической деятельности.</p>	<p>ОПК-1.1. Применяет математический аппарат, теоретические и методологические основы математических дисциплин для решения профессиональных задач в области физики и смежных с ней областях.</p> <p>ОПК -1.2. Использует теоретические основы базовых разделов математических и естественно-научных дисциплин при решении профессиональных задач в области физики и смежных с ней областях.</p> <p>ОПК -1.3 Работает с учебной литературой в области физики и смежных с ней областях, необходимых в профессиональной деятельности.</p>	<p>Знать строение атомов: свойства атома водорода, свойства многоэлектронных атомов, квантовые числа, термы атомов, приближение ls- и jj- связей, правила Хунда, спектральные свойства атомов, правила отбора; строение молекул: валентность, химическая связь, гибридизация, колебательные и вращательные движения, молекулярные спектры, правила отбора;</p> <p>-основы взаимодействия атомов и молекул с излучением и заряженными частицами: особенности излучения, поглощения и рассеяния света, рассеяния частиц атомами, молекулами, веществом.</p> <p>Уметь решать типовые учебные задачи по основным разделам химии, связанным с образованием химических связей, молекулярными орбиталями, корреляционными диаграммами, гибридизацией;</p> <p>- решать типовые учебные задачи на классические и квантовые модели атома, атомные спектры, взаимодействие атомов, описание структуры молекул, молекулярные спектры,</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>процессы излучения, поглощения и рассеяния света атомами и молекулами, в том числе в сплошной среде, атомы и молекулы во внешних электрических и магнитных полях.</p> <p>Владеть навыками использования теоретических основ химии при решении смежных физических задач;</p> <p>- навыками использования теоретических основ различных областей физики при решении конкретных физических задач, связанных с атомно-молекулярными процессами.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул» направлена на обучение студентов-физиков, получивших базовую подготовку по общефизическим дисциплинам, основными из которых является дисциплины «Квантовая механика-1», «Квантовая механика-2». Для успешного освоения дисциплины, обучающиеся должны знать основы классической и квантовой механики, электродинамику с элементами физической оптики, квантовую электродинамику, а также должны иметь базовые знания по химии.

Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул» читается в седьмом семестре четвертого курса после практической дисциплины «Атомный практикум», который студенты проходят на 3 курсе. В настоящей программе учтено, что многие вопросы атомной физики студенты осваивают при выполнении лабораторных работ в практикуме.

3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

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	Консультации в период занятий	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
7	144	32	32			56	18	4			2

Дисциплина «Физика и химия атомов и молекул»:
всего 144 часов/ 4 зачетных единиц

из них: - контактная работа 70 часов
Компетенции: ОПК-1

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, задания к практическим занятиям, консультации, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: контрольные работы, задания для самостоятельного решения.
- промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа:

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- практические занятия – 32 часа;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 56 часов;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена и экзамен) – 24 часа;

Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, семинарского типа, групповые консультации, экзамен) составляет 70 часов.

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

Общая трудоемкость дисциплины «Физика и химия атомов и молекул» составляет 4 зачетные единицы, 144 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа в течение семестра (не включая период сессии)		
				Лекции	Практические занятия			
1	2	3	4	5	6	7	8	
1	Одно- и многоэлектронные атомы. Электронные оболочки. Энергия стационарных состояний сложных атомов. Атомы с одним и двумя валентными электронами.	1	8	2	2	4		
2	Приближенные методы расчета энергии атомов со многими электронами (метод Слейтера, вариационный, Хартри-Фока, Томаса-Ферми) Связь между моментами. Возмуще-	2-3	14	4	4	6		

	ния в сериях. Последовательность заполнения электронных оболочек. Периодическая таблица.							
3	Термы атомов. Одно- и двухэлектронные спектры. Рентгеновские спектры.	4	8	2	2	4		
4	Потенциалы взаимодействия атомных частиц. Мультипольное и обменное, короткоживущее и дальнедействующее взаимодействия.	5	8	2	2	4		
5	Проведение потоковой контрольной. Разбор, обсуждение и решение задач.	6	6	2	2	2		
6	Образование молекул. Ковалентная и ионная связь. Расчет энергии состояний. Ион H_2^+ и молекула водорода. Молекулярные орбитали. Квантовые числа и электронные конфигурации двухатомных молекул.	7	8	2	2	4		
7	Структура многоатомных молекул. Гибридизация. Симметрия молекул и её влияние на их свойства. Фуллерены.	8	8	2	2	4		
8	Молекулярные спектры. Молекула, как сферический, симметричный или ассиметричный волчок. Вращательные, колебательные и электронные состояния молекул.	9	8	2	2	4		
9	Время жизни электронно-возбужденных состояний атомов и молекул. Уширение спектральных линий: естественное, столкновительное и доплеровское. Эффект Дике сужения линий.	10	8	2	2	4		
10	Атом и молекула в постоянных электрических и магнитных полях. Дипольный и квадрупольный моменты, поляризуемость. Спектры атомов в слабом и сильном магнитном поле. Эффекты Зеемана и Штарка.	11	8	2	2	4		
11	Усиление и поглощение света. Оптическая накачка и просветление линий. Лазеры. Пленение и диффузия излучения. Сверхизлучение.	12	7	2	2	3		
12	Рассеяние света на атомах и молекулах. Резонансная флуоресценция и упругое рассеяние. Нелинейная оптика. Многофотонное взаимодействие. Комбинационное рассеяние.	13	7	2	2	3		
13	Движение атомов в резонансных световых полях. Давление света на атомы, светоиндуцированный дрейф в газе и ток в плазме. Оптогальванический эффект.	14	4	1	1	2		
14	Определение характеристик частиц (потенциала взаимодействия) по кинематике парных столкновений (упругое рассеяние, ионизация, возбуждение).	14	4	1	1	2		
15	Обменные процессы при столкновении частиц. Передача возбуждения, перезарядка, рекомбинация, прилипание.	15	4	1	1	2		

17	Распространение быстрых заряженных частиц через вещество. Ионизационные и радиационные потери. Излучение Вавилова-Черенкова. Особенности распространения γ -квантов в веществе. Фотоэффект, комптон-эффект. Образование электрон-позитронных пар. Основы дозиметрии.	15	4	1	1	2		
18	Проведение потоковой контрольной. Разбор, обсуждение и решение задач.	16	6	2	2	2		
19	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18					18
20	Экзамен		6				2	4
Всего			144	32	32	56	2	22

Программа практических занятий (32 часа)

В программе практических занятий указаны основная тема и конкретные вопросы.

1. Классические и квантовые модели атома (2 часа).

Модель Томсона. Планетарная модель Резерфорда. Атом Бора.

Атом водорода (квантовая теория). Схема решения уравнения Шредингера. Квантовые числа. Кулоновское (случайное) вырождение. Атомные орбитали. Спектр атома водорода: правила отбора, тонкая и сверхтонкая структура.

2. Водородоподобные атомы (2 часа).

Атомы щелочных металлов. Поправка Ридберга. Снятие случайного вырождения. Серийные закономерности. Дублетное расщепление. Спин электрона.

3. Многоэлектронные атомы (2 часа).

Приближение центрально-симметричного самосогласованного поля. Модель Томаса-Ферми. Электронные оболочки и слои. Принцип Паули. Правило Хунда по заполнению электронной оболочки. Таблица Менделеева. Рентгеновские спектры.

4. Энергия многоэлектронного атома. Атомные спектры (2 часа).

Спин-орбитальное, спин-спиновое электронное и электрон-ядерное взаимодействия. Несохранение моментов. Квантовые числа L , S и J . Приближение LS- и jj-связи. Определение энергетического состояния (термов) многоэлектронного атома внутри электронной конфигурации. Правила Хунда, определяющие относительную энергию термов. Диаграммы Гроттриана.

5. Взаимодействие атомов (2 часа).

Обменное (короткодействующее) взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовское (дальнодействующее) взаимодействие.

1-я контрольная работа (2 часа).

6. Химическая связь (2 часа).

Образование молекул. Ковалентная и ионная связи. Валентность. Схема решения уравнения Шредингера для иона водорода. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Молекула водорода.

7. Структура молекул (2 часа).

Молекулярные орбитали. Корреляционные диаграммы. Гибридизация. Симметрия молекул.

8. Энергетические уровни молекул. Молекулярные спектры (2 часа).

Разделение энергии молекулы на электронную, колебательную и вращательную. Вращательные уровни молекул двух типов: симметричных и несимметричных волчков. Молекулярные термы двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.

9. Интенсивность спектральных линий (4 часа).

Время жизни возбужденных состояний. Дипольное излучение. Матричные элементы, правила отбора. Коэффициенты Эйнштейна. Силы осцилляторов. Интенсивность спектральных линий. Однородное и неоднородное уширение контура. Эффект Дике. Усиление и поглощение света.

10. Атомы и молекулы во внешних электрических и магнитных полях (2 часа).

Магнитный момент атома. Множитель Ланде (g-фактор) Простой и сложный эффект Зеемана. Явление Пашена-Бака. Магнитный резонанс: спиновой и ядерный. Эффект Штарка.

11. Рассеяние света на атомах и молекулах (2 часа).

Резонансная флуоресценция и упругое рассеяние. Нелинейная оптика. Многофотонное взаимодействие. Эффект Рамана.

12. Движение атомов в резонансных световых полях (1 час).

Давление света на атомы, светоиндуцированный дрейф в газе и ток в плазме. Оптогальванический эффект.

13. Взаимодействие атомов и молекул при столкновениях (1 час).

Упругое рассеяние, ионизация, возбуждение.

14. Обменные процессы при столкновениях (1 час).

Передача возбуждения, перезарядка, рекомбинация, прилипание.

15. Основы дозиметрии (1 час).

2-я контрольная работа (2 часа).

Задачи к практическим занятиям

1. Классические и квантовые модели атома

1. Согласно модели Томсона, найти радиус атома водорода и длину волны испускаемого им света, если его энергия ионизации равна 13,6 эВ.
2. Найти вероятность того, что α -частица с энергией 3 МэВ при прохождении свинцовой фольги толщиной 1,5 мкм испытает рассеяние в интервале углов $59-61^\circ$.
3. Оценить время, за которое электрон, движущийся вокруг ядра водорода по орбите $r=0.5A$, упал бы на ядро, если бы он терял энергию на излучение в соответствии с классической теорией.
4. Частица массой m движется по круговой орбите в поле $U=\chi r^2/2$. Найти с помощью боровского условия квантования разрешенные уровни энергии и соответствующие радиусы орбит.
5. Пренебрегая спин-орбитальным взаимодействием для атомарного водорода вычислить:
 - а) в каких пределах должна лежать энергия бомбардирующих электронов, чтобы спектр излучения атома имел только три линии, указать их длины волн;
 - б) минимальную разрешающую способность спектрометра $\lambda/\delta\lambda$, при которой можно разрешить первые 20 линий серии Бальмера;
6. Вычислить для мезоатома водорода (масса мезона составляет 207 масс электрона):

- а) радиус первой борховской орбиты;
 - б) длину волны резонансной линии;
 - в) энергии связи основных состояний, когда ядром является протон или дейтон; сравнить изотопический сдвиг со сдвигом в атоме водорода.
7. Найти для позитрония:
 - а) радиус первой борховской орбиты;
 - б) потенциал ионизации;
 - в) постоянную Ридберга и длину волны резонансной линии.
 8. Для атомарного водорода построить схему возможных переходов для головной линии серии Бальмера с учетом тонкой структуры. Определить интервал (в см^{-1}) между крайними компонентами.
 9. Оценить (в электронвольтах) расщепление $2P$ -состояния позитрония, вызванное взаимодействием спиновых магнитных моментов позитрона и электрона.
 10. Оценить по порядку величины длину волны излучения межзвездного атомарного водорода в радиодиапазоне. Межзвездный водород находится в основном состоянии, и его излучение обусловлено переориентацией спина электрона.

2. Водородоподобные атомы

1. Найти константу C_1 дипольной составляющей потенциала атомного остова атома рубидия, если известно, что квантовый дефект $\Delta=1.3$ при $l=2$.
2. Термы атомов и ионов с одним валентным электроном можно представить в виде $T=R(Z-a)^2/n^2$, где Z – заряд ядра (в e); a – поправка экранирования, n – главное квантовое число. Вычислить, a и n валентного электрона атома лития, если известно, что ионизационные потенциалы Li и Be^+ равны соответственно 5.39 и 17.0 эВ и поправка, a для них одинакова.
3. Определить по спектру излучения поправку Ридберга (квантовый дефект) для терма $\text{Na } 5s \ ^2S_{1/2}$, и постоянную C_1 , характеризующую величину дипольного момента.
4. Головная линия резкой серии цезия является дублетом с длинами волн 1469,5 и 1358,8 нм. Найти интервалы (в см^{-1}) между компонентами следующих линий этой серии.

3. Многоэлектронные атомы

1. Рассмотреть гелиеподобный ион в основном состоянии в первом порядке теории возмущений, выбрав в качестве невозмущенных водородоподобные функции с эффективным зарядом.
2. На основе вариационного метода определить потенциал ионизации атома гелия и иона лития.
3. В рамках модели Томаса-Ферми определить полную энергию электронов атома, потенциальную энергию взаимодействия электронов с зарядом ядра, а также энергию межэлектронного взаимодействия.
4. Установить каким элементам принадлежат следующие K_α линии рентгеновского излучения 1,935 Å; 1,787 Å.
5. Определить поправки экранирования Мозли для K_α -линий атомов Sn, Cs и W, длины волн которых равны соответственно 0,492 Å, 0,402 Å, 0,210 Å.
6. Найти кинетическую энергию электронов, вырываемых с K -оболочки атомов молибдена K_α -излучением серебра.

4. Энергия многоэлектронного атома. Атомные спектры.

1. Найти термы атомов, незаполненная электронная подоболочка которого – np^2 . То же для nd^2 .
2. Выписать возможные типы термов для электронной конфигурации: $ns^1 n'p^2$. То же для $np^1 n'p^2$.

3. Определить число электронов в единственной незаполненной подоболочке атома, основной терм которого: $3F_2$; $6S_{5/2}$.
4. Определить спин ядра ^{59}Co , основной терм атома которого содержит восемь компонент сверхтонкого расщепления.

5. Взаимодействие атомов.

1. Выразить квадрупольный момент электрона с орбитальным моментом l через средний квадрат его расстояния до центра.
2. Определить дальнедействующую часть потенциала взаимодействия иона с атомом.
3. Найти потенциал дальнедействующего взаимодействия двух атомов, если орбитальный момент одного из них равен нулю.
4. Определить поляризуемость атома водорода в основном состоянии.
5. Определить дальнедействующую часть потенциала взаимодействия дипольной молекулы и атома с нулевым моментом.

6. Химическая связь.

1. Произвести разделение переменных в уравнении Шредингера для электронных термов иона молекулярного водорода, воспользовавшись эллиптическими координатами.
2. Записать обозначения возможных термов молекул H_2 , N_2 , O_2 , Cl_2 , которые могут получиться при соединении атомов в нормальных состояниях.
3. То же для молекул HCl и CO .
4. Определить электронные термы молекулярного иона H_2^+ , получающегося при соединении атома H в нормальном состоянии с ионом H^+ , при расстояниях между ядрами, превышающих боровский радиус.

Разбор 1-й контрольной работы.

7. Структура молекул.

1. Определить валентность атома I в основном состоянии, атома кислорода в состоянии $2p^2 3s^1 p^1$. Какова валентность азота в азотной кислоте?
2. Записать выражение для внешней электронной конфигурации молекулы CO и молекулярного иона CO^+ . Сколько связей имеется в каждом случае, и какова их природа? Энергия связи какой молекулы сильнее? То же для молекул NO , NO^+ .
3. Напишите выражение для внешних электронных конфигураций F_2 , F_2^+ , и F_2^- и определите в каждом случае число получающихся связей. Какие из конфигураций имеют наивысшую и наименьшую энергии связи?
5. Построить корреляционные диаграммы для молекул B_2 и BH .
6. Нарисовать конфигурацию электронных облаков гексафторида серы, углекислого газа, воды. Определить степень гибридизации.

8. Энергетические уровни молекул. Молекулярные спектры.

1. Найти соотношение между характерными временами столкновения двухатомных молекул и характерными временами колебательного и вращательного движений.
2. Соответствующая переходу $J=0 \rightarrow J=1$ линия поглощения вращательного спектра наблюдается у $^{12}\text{C} \ ^{16}\text{O}$ при $1,153 \cdot 10^{11}$ Гц и при $1,102 \cdot 10^{11}$ Гц у молекулы $^{13}\text{C} \ ^{16}\text{O}$. Найти массовое число изотопа углерода.
3. Предположите, что молекула водорода ведет себя в точности как гармонический осциллятор с коэффициентом жесткости 516 Н/м. Вычислите колебательное квантовое число, соответствующее энергии диссоциации молекулы $4,5$ эВ. Определите разность энергий диссоциации молекул D_2 и H_2 .

4. Найти энергию, необходимую для возбуждения молекулы H_2 из основного состояния на первый колебательный уровень ($v=1$). Во сколько раз эта энергия больше энергии возбуждения данной молекулы на первый вращательный уровень ($J=1$). ($d=0,741 \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}$; $\nu=4395,2 \text{ см}^{-1}$; $\chi=28,5 \cdot 10^{-3}$).
5. Определить максимально возможное колебательное квантовое число, соответствующую колебательную энергию и энергию диссоциации двухатомной молекулы, собственная частота которой ω и коэффициент ангармоничности χ . Вычислить эти величины для H_2 ($\nu=4395,2 \text{ см}^{-1}$; $\chi \nu = 125 \text{ см}^{-1}$).
6. Найти момент инерции молекулы CH и расстояние между ее ядрами, если интервалы между соседними линиями чисто вращательного спектра этой молекулы $\Delta\nu=29,0 \text{ см}^{-1}$.
7. Определить наиболее вероятную угловую скорость вращения молекулы кислорода при $T=300^\circ\text{K}$. Межъядерное расстояние $1,21 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.
8. Найти относительный изотопический сдвиг $\Delta\lambda/\lambda$ линий чисто колебательного и чисто вращательного спектров смеси молекул H^{35}Cl и H^{37}Cl .

9. Интенсивность спектральных линий.

1. Объем газообразного лития, содержащий $N=3,0 \cdot 10^{16}$ атомов при $T=1500\text{K}$, излучает резонансную линию ($\lambda = 670,8 \text{ нм}$; $2P \rightarrow 2S$) мощностью $I=0,25 \text{ Вт}$. Найти среднее время жизни L_i в $2P$ -состоянии.
2. Атомарный водород находится в термодинамическом равновесии со своим излучением. Вычислить:
 - а) отношение вероятностей индуцированного и спонтанного излучений атомов с уровня $2P$ при $T=3000\text{K}$;
 - б) температуру, при которой эти вероятности одинаковы.
3. Найти характер углового распределения интенсивности излучения при переходе между уровнями $2P$ ($m_l=0$) и $1S$ в атоме водорода. То же для $m_l=\pm 1$.
4. Спектральная линия $\lambda=532,0 \text{ нм}$ возникает в результате перехода между двумя возбужденными состояниями атома, средние времена жизни которых равны 12 и 20 нс. Оценить естественную ширину этой линии $\Delta\lambda$.
5. В атоме Na для оптического перехода $3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 2s \ ^2S_{1/2}$ сила осциллятора равна 0,76. Вычислить время жизни уровня $3p \ ^2P_{3/2}$.
6. Определить давление газа, находящегося при $T=1000^\circ\text{K}$, при котором ударное уширение спектральной линии $\lambda = 570 \text{ нм}$ окажется равным доплеровской ширине. Газокинетический диаметр атомов $5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.
7. Определить относительные интенсивности компонент тонкой структуры спектральных линий атомов щелочных металлов.
8. Найти вероятность перехода между компонентами сверхтонкой структуры атома водорода для уровня $1s \ ^2S_{1/2}$.

10. Атомы и молекулы во внешних электрических и магнитных полях.

1. При известных L и S определить с помощью закона косинусов g -фактор Ланде.
2. Вычислить g -фактор для атомов:
 - а) с одним валентным электроном в состояниях S , P и D ;
 - б) в состоянии 3P ;
 - в) в S -состояниях;
 - г) в синглетных состояниях.
3. Максимальное значение проекции магнитного момента атома, находящегося в D_2 -состоянии, равно четырем магнетонам Бора. Определить мультиплетность этого термина.
4. Возможно ли, чтобы фактор Ланде был больше 2, меньше 1, меньше нуля? Приведите примеры.

5. При какой индукции магнитного поля интервал между зеемановскими компонентами термов $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ атома Na будет равен 0,1 тонкого расщепления 3^2P -состояния, если длины волн желтого дублета натрия равны $\lambda_1=589,593$ и $\lambda_2=588,996$ нм.
 6. Какой эффект Зеемана (простой, сложный) будет наблюдаться в слабом магнитном поле для переходов: $^1P \rightarrow ^1S$, $^2D_{5/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$, $^3D_1 \rightarrow ^3P_0$, $^5I_5 \rightarrow ^5H_4$?
 7. Найти штарковское расщепление уровней водорода в случае, когда расщепление мало по сравнению с интервалами тонкой структуры (но велико по сравнению с лэмбовским сдвигом).
11. Рассеяние света на атомах и молекулах.
1. Вычислить сечение рассеяния фотона малой частоты на атоме водорода в основном состоянии.
 2. Найти сечение рассеяния электромагнитной волны на многоэлектронном атоме в классическом приближении, при условии, что длина волны больше размера атома.
 3. Определить частоту колебаний ω молекулы HF, если в спектре рамановского рассеяния волны с $\lambda=435,0$ нм разность между ближайшей стоксовой и антистоксовой компонентой равна $\Delta\lambda=154,0$ нм. Анггармонизм молекулы $\chi=0,0218$.
 4. Водород при температуре 1500К и давлении 1 атм облучается излучением одинаковой интенсивности на двух длинах волн: головной линии серии Бальмера и 656.3 нм. Найти отношение интенсивностей рассеянных сигналов.
 5. Найти отношение интенсивностей фиолетового и красного спутников, ближайших к несмещенной линии, в спектре рамановского рассеяния света на молекулах Cl_2 при $T=300K$. Во сколько раз изменится это соотношение при увеличении температуры вдвое?
 6. Ближайшие сателлиты спектра рамановского рассеяния излучения с $\lambda=546,1$ нм на молекулярном азоте отстоят на $\Delta\lambda=0,72$ нм. Найти вращательную постоянную $B, \text{см}^{-1}$, и момент инерции молекулы N_2 .
12. Движение атомов в резонансных световых полях
1. Определить скорость, которую приобрел покоящийся атом водорода в результате излучения фотона при переходе из первого возбужденного состояния в основное. На сколько процентов отличается энергия испущенного фотона от энергии данного перехода.
 2. Оценить вероятность спонтанного излучения молекулы $\omega_{сп}$ при переходе с возбужденного уровня E_m на уровень E_n в случае, когда молекула помещена внутрь объемного резонатора, настроенного на частоту $\omega=(E_m - E_n)/\hbar$. Соответствующая вероятность спонтанного излучения в свободном пространстве равна $\omega_{сп}^0$. Объем резонатора – V , его добротность – Q . Считать, что ширина молекулярных уровней Γ все время остается меньше ширины линии резонатора: $\Gamma < \omega/ Q$.
13. Взаимодействие атомов и молекул при столкновениях
1. Вычислить сечение захвата иона одного газа атомом другого газа вследствие поляриционного взаимодействия.
14. Обменные процессы при столкновениях.
1. Определить сечение резонансной перезарядки высоковозбужденного атома на ионе в пределе малых скоростей столкновения.
 2. Определить сечение передачи возбуждения от дипольной молекулы (возбужден первый колебательный уровень) к такой же молекуле в основном состоянии.
 3. Найти связь между сечением фотораспада атома и сечением фотоприлипания к нему.

Разбор 2-й контрольной работы.

15. Основы дозиметрии.

1. Ионизационная камера наполненная воздухом ($V=5\text{л}$, $p=250\text{ кПа}$, $T=300\text{К}$) помещена в однородное поле γ -излучения. Ток насыщения $I=0,32\text{мкА}$. Определить мощность экспозиционной дозы.
2. Найти в воздухе и воде в точках, где плотность потока γ -фотонов с энергией $E=2,00\text{ МэВ}$ составляет $J=1,30\cdot 10^4\text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ мощности поглощенной и экспозиционной доз.
3. На поверхности кожи площадью $S=2,0\text{ см}^2$ падает нормально $N=3,2\cdot 10^4$ α -частиц с $E=5,1\text{ МэВ}$. Найти средние значения поглощенной и эквивалентной доз, мГр и мЗв, в слое, равном глубине проникновения α -частиц в биологическую ткань. *Справка:* пробег α -частиц в биологической ткани в 815 раз меньше пробега в воздухе; коэффициент качества для указанных α -частиц $K=20$.

Самостоятельная работа студентов (74 часа)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям, решение задач	52
Подготовка к контрольным работам	4
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Бурмасов В.С., Оришич А.М. Физика и химия атомов и молекул. Учеб. пос. Новосибирск. НГУ, 2006.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: [учеб. пособие для физ. спец. ун-тов: в 10 т.] Т.3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – Изд. 4-е, испр. – Москва: Наука, 1989. – 767 с.
3. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика: [учеб. пособие для физ. спец. ун-тов: в 10 т.] Т.4: Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989.
4. Чичинин А.И. Атомная и молекулярная спектроскопия / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. – 880 с.

5.2. Дополнительная литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики: [учебное пособие для физических специальностей вузов : в 5 т.] Т.5: Атомная и ядерная физика: [в 2 ч.]. Ч.1: Атомная физика. – Москва : Наука, 1986. – 416 с.
2. Иродов И.Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике: [для физ. спец. вузов]. – 7-е изд., перераб. и доп. – М. : Энергоатомиздат, 1984. – 215 с.

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

1. Иванов К. Л., Маслов Н. А., Цибульская Е. О., Карташов И. А., Лукзен Н. Н., Дубов Д. Ю., Горбунов О. А. Физика и химия атомов и молекул в задачах с решениями: учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2017. – 172 с.

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

1. Информационная система «Электронная структура атомов» – <http://grotrian.nsu.ru/ru>

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 MS Office.

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, групповых консультаций, текущего контроля, промежуточной 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.

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 на практических занятиях преподавателем при решении задач студентом, обсуждаются способы решения задач, рекомендованных для практических занятий. В течение семестра проводятся две контрольные работы и прием обязательных заданий по дисциплине. Результаты текущего контроля служат основанием для выставления оценок в ведомость контрольной недели на факультете.

Промежуточная аттестация.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Необходимым условием получения положительной оценки на экзамене является решение и сдача 60% задач из заданий, выполняемых в течение семестра. Экзамен проводится в конце

семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенций ОПК-1, ОПК-3. 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.

Итоги промежуточной аттестации (экзамена) оцениваются по пятибалльной шкале:

Если перед началом экзамена у студента сдано менее 60% задач из заданий, то до ответа на вопросы экзамена ему даётся 30 минут на то, чтобы сдать оставшиеся задачи. Если студенту не удаётся этого сделать за отведённое время, то он не приступает к ответу на устные вопросы, а получает оценку «неудовлетворительно».

Для получения оценки **«отлично»** необходимо развёрнуто ответить на оба вопроса и решить без ошибок задачу. Также надо ответить на дополнительные вопросы по всей дисциплине (продвинутый уровень освоения компетенций).

Для получения оценки **«хорошо»** нужно ответить на оба вопроса билета и решить задачу. Допускается несколько несущественных ошибок. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины (базовый уровень освоения компетенций).

Для получения оценки **«удовлетворительно»** за ответы на вопросы, содержащиеся в билете, необходимо:

- ответить хотя бы на один вопрос в билете по теории и решить задачу, при решении задачи допускаются ошибки, не влияющие на общий способ предлагаемого решения. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для изученной дисциплины (пороговый уровень освоения компетенций).

Оценка **«неудовлетворительно»** ставится, когда уровень усвоения компетенций не сформирован.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-1.1. Применяет математический аппарат, теоретические и методологические основы математических дисциплин для решения профессиональных задач в области физики и смежных с ней областях.	Знать строение атомов: свойства атома водорода, свойства многоэлектронных атомов, квантовые числа, термы атомов, приближение ls- и jj- связей, правила Хунда, спектральные свойства атомов, правила отбора; строение молекул: валентность, химическая связь, гибридизация, колебательные и вращательные движения, молекулярные спектры, правила отбора; -основы взаимодействия атомов и молекул с излучением и заряженными частицами: особенности излучения, поглощения и рассеяния света, рассеяния частиц атомами, молекулами, веществом.	Проверка задач для самостоятельного решения, проведение контрольных работ, экзамен.

<p>ОПК -1.2. Использует теоретические основы базовых разделов математических и естественнонаучных дисциплин при решении профессиональных задач в области физики и смежных с ней областях.</p>	<p>Уметь решать типовые учебные задачи по основным разделам химии, связанным с образованием химических связей, молекулярными орбиталями, корреляционными диаграммами, гибридизацией;</p> <p>- решать типовые учебные задачи на классические и квантовые модели атома, атомные спектры, взаимодействие атомов, описание структуры молекул, молекулярные спектры, процессы излучения, поглощения и рассеяния света атомами и молекулами, в том числе в сплошной среде, атомы и молекулы во внешних электрических и магнитных полях.</p>	<p>Проверка задач для самостоятельного решения, проведение контрольных работ, экзамен.</p>
<p>ОПК -1.3 Работает с учебной литературой в области физики и смежных с ней областях, необходимых в профессиональной деятельности.</p>	<p>Владеть навыками использования теоретических основ химии при решении смежных физических задач;</p> <p>- навыками использования теоретических основ различных областей физики при решении конкретных физических задач, связанных с атомно-молекулярными процессами.</p>	<p>Проверка задач для самостоятельного решения, проведение контрольных работ, экзамен.</p>

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Физика и химия атомов и молекул».

Таблица 10.2

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции)	Критерии оценивания результатов обучения	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
ОПК 1.1	Полнота знаний	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. 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.
ОПК 1.2	Наличие умений	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.
ОПК-1.3	Наличие навыков (владение опытом)	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.

10.3 Типовые контрольные, задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примерный образец контрольной работы №1

1. Пользуясь правилами Хунда, определить значения L , S , J основного состояния атома урана.
2. Электронная конфигурация атома железа $3d^64s^2$. В приближении LS -связи найдите все порождаемые ею термы и укажите терм основного состояния. Из эксперимента известно, что для иона Fe^+ основным термом является ${}^6D_{9/2}$. Какой из валентных электронов атома железа (d или s) удаляется при такой ионизации?
3. Для элементов конца периодической системы поправка в законе Мозли значительно отличается от единицы. Убедиться в этом на примере олова, цезия и вольфрама, длины волн $K\alpha$ -линий которых равны соответственно 49,2, 40,2, 21,0 пм.
4. С какой минимальной скоростью должен двигаться атом водорода, чтобы в результате неупругого лобового соударения с другим, покоящимся атомом водорода, один из них испустил фотон?
5. Найти энергию фотона при переходе $n=2 \rightarrow n=1$ в мезоатоме с массой 140 а.е.м. и зарядом ядра $Z=60$

Примерный образец контрольной работы №2

1. Определить нормальный терм молекулы KCl , образовавшейся в результате соединения атомов в нормальных состояниях.
2. Во вращательном спектре поглощения молекулы $H^{35}Cl$ ($B \approx 10.56 \text{ см}^{-1}$) линии, регистрируемые при 106 см^{-1} и при 233.2 см^{-1} , имеют одинаковую интенсивность. Считая вероятности переходов равными, определить температуру газа.
3. При переходе атома Na из возбужденного в основное состояние линия расщепилась в магнитном поле на шесть компонент. Определить терм возбужденного состояния.
4. Найти значение температуры, при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения молекул N_2 равна их вращательной энергии в состоянии с квантовым числом $J=1$.
5. Оценить наиболее вероятную угловую скорость вращения молекулы CO при $T=300 \text{ К}$, если расстояние между атомами $0,113 \text{ нм}$.

Обязательные задания по дисциплине:

Задание № 1. Сдать в течение шестой недели обучения.

1. Определить дальнедействующую часть потенциала взаимодействия иона с атомом.
2. Найти потенциал взаимодействия двух атомов, орбитальный момент одного из них равен нулю.
3. Определить поляризуемость отрицательного иона в состоянии $s^2 \ ^1S$ в приближении потенциала нулевого радиуса.
4. Определить поляризуемость атома водорода в основном состоянии.
5. Определить дальнедействующую часть потенциала взаимодействия дипольной молекулы и атома с нулевым моментом.

Задание № 2. Сдать в течение двенадцатой недели обучения.

1. Определить расщепление уровня энергии иона инертного газа, который взаимодействует с атомом инертного газа.
2. Определить дальнедействующий потенциал взаимодействия двух атомов с ненулевым моментом.
3. Определить сечение резонансной перезарядки сильно возбужденного атома на ионе в пределе малых скоростей.
4. Найти соотношение между характерными временами столкновения двухатомных молекул и характерными временами колебательного и вращательного движений.
5. Молекулярный ион с сильно возбужденной вращательной энергией движется в атомном газе с поляризуемостью R и температурой T , По какому закону изменяется средняя вращательная энергия? Указание: использовать классическую теорию.

Задание № 3. Сдать в течение шестнадцатой недели обучения.

1. Определить сечение передачи возбуждения от дипольной молекулы (возбужден первый колебательный уровень) к такой же молекуле в основном состоянии.
2. Определить сечение возбуждения колебательного уровня дипольной молекулы столкновением с заряженной частицей.
3. Найти сечение фоторазрушения атомной системы.
4. Найти связь между сечением фотораспада атома и сечением фотоприлипания к нему.

Образец билета на экзамене:

1. Связь между моментами. Возмущения в сериях. Последовательность заполнения электронных оболочек. Периодическая таблица.
2. При какой температуре доплеровское уширение каждой компоненты дублета спектральной линии $2^2P - 1^2S$ атомарного водорода равно интервалу между этими компонентами?

Форма экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)**

Физический факультет

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____

- 1
2

Составитель _____ /Ф.И.О. преподавателя/
(подпись)

« ____ » _____ 20 ____ г.

Вопросы к экзамену:

1. Энергия стационарных состояний сложных атомов. Приближенные методы расчета энергии атомов со многими электронами. Термы атомов.
2. Атомы с одним валентным электроном. Одноэлектронные термы и спектры.
3. Атомы с двумя валентными электронами. Двухэлектронные термы и спектры.
4. Связь между моментами. Возмущения в сериях. Последовательность заполнения электронных оболочек. Периодическая таблица.
5. Рентгеновские спектры атомов.
6. Образование молекул. Ковалентная и ионная связь. Молекулярные орбитали. Квантовые числа и электронные конфигурации двухатомных молекул.
7. Расчет энергии состояний молекул. Ион H_2^+
8. Расчет энергетических состояний молекулы водорода.
9. Структура многоатомных молекул. Гибридизация.
10. Молекулярные спектры. Молекула, как сферический, симметричный или ассиметричный волчок. Вращательные, колебательные и электронные состояния молекул.
11. Время жизни электронно-возбужденных состояний атомов и молекул. Вероятность перехода и естественное уширение спектральных линий:
12. Уширение спектральных линий: столкновительное и доплеровское.
13. Эффект Дике (сужения линий).
14. Сечение усиления и поглощения света.
15. Рассеяние света на атомах и молекулах. Индуцированная резонансная флуоресценция и упругое рассеяние.
16. Нелинейная оптика. Многофотонное взаимодействие. Комбинационное рассеяние.

17. Движение атомов в резонансных световых полях. Давление света на атомы.
18. Светоиндуцированный дрейф в газе и ток в плазме.
19. Обменные процессы при столкновении частиц. Передача возбуждения, перезарядка.
20. Обменные процессы при столкновении частиц. Рекомбинация.
21. Распространение быстрых заряженных частиц через вещество. Ионизационные и радиационные потери. Излучение Вавилова-Черенкова.
22. Основные особенности и эффекты распространения γ -квантов в веществе. Фотоэффект, комптон-эффект. Образование электрон-позитронных пар.

Примерные задачи к экзамену.

1. Выписать спектральные обозначения термов электрона в атоме водорода для $n=3$. Сколько компонент тонкой структуры имеет уровень атома водорода с главным квантовым числом n .
2. Длина волны резонансной линии ртути $\lambda = 253,65$ нм. Среднее время жизни соответствующего резонансного уровня $\tau = 0,15$ мкс. Оценить отношение доплеровского уширения этой линии при $T = 300$ К к ее естественной ширине.
3. Выписать возможные термы атомов, содержащих кроме заполненных оболочек два электрона, p и d .

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.

**Лист актуализации программы по дисциплине
«Физика и химия атомов и молекул»
по направлению подготовки 03.03.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного