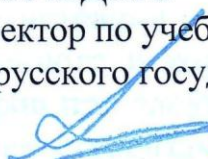


Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
Белорусского государственного университета



А. Л. Толстик
(подпись)

26.06.2017

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 4211 /уч.

**ЛАБОРАТОРНЫЙ СПЕЦПРАКТИКУМ
«АТОМНАЯ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ И ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ»**

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности
1-31 81 02 Фотоника**

Минск 2017 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 81 02-2012; учебного плана № G31-240/уч.

СОСТАВИТЕЛЬ:

К.Ф. Ермалицкая – доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент;

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета (протокол № 12 от 26.05.2017 г.);

Советом физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 12 от 26.06.2017 г.);

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель лаборатории специализации — сформировать у студентов навыки работы со спектрометрами, регистрации и последующей обработки спектров, создания методик качественного и количественного анализа многокомпонентных сплавов и растворов при электрическом и лазерном возбуждении спектров, а также освоение студентами простейших видов молекулярной спектроскопии, таких как вращательные, колебательные и колебательно-вращательные спектры молекул.

Основные задачи учебной дисциплины — ознакомление студентов с основами атомно-эмиссионного анализа, методами возбуждения и регистрации спектров, спектральными методами определения температуры плазмы электрических разрядов, формирования представления о научных подходах к анализу спектров простейших молекул, обучение анализу вращательных и колебательных спектров молекул и применению их в научной и производственной деятельности.

Атомная спектроскопия как метод качественного, количественного, полуколичественного анализа объектов используется уже более полутора веков, однако до сих пор не утратила свою актуальность. Наиболее распространенной разновидностью этого метода является атомно-эмиссионный спектральный анализ, основанный на возбуждении спектров атомов электрическими разрядами, лазерным импульсом и др., и регистрацией аналитического сигнала визуальным, фотографическим и фотоэлектрическим методом.

Предлагаемая программа решает задачи ознакомления студентов с основами атомно-эмиссионного анализа, методами возбуждения и регистрации спектров, спектральными методами определения температуры плазмы электрических разрядов и лазерных импульсов. Кроме того, студенты знакомятся с новым теоретическим материалом — принципом электрического возбуждения плазмы, спектральными методами определения температуры плазмы, подходами к полуколичественному и количественному анализу.

Молекулярная спектроскопия как наука в последние десятилетия достигла высокого совершенства. Научные сотрудники и инженеры способны регистрировать спектры с высоким временным и спектральным разрешением. Это позволяет более глубоко изучать строение и свойства молекул и вещества. Поэтому начальное знакомство с методами длинноволновой спектроскопии (вращательные и колебательные спектры молекул) является необходимым элементом для глубокой подготовки оптика, специализирующегося по лазерной физике и спектроскопии.

На начальном этапе обучения студент основательно готовится по колебательной спектроскопии молекул и ее возможностям. Изучает уровни энергии вращательных и колебательных степеней свободы молекулы, начиная от простейших двухатомных молекул и заканчивая многоатомными молекулами. Основное внимание уделяется построению уровней энергии (теоретические расчеты), заселению в интенсивности линий и полос в спектрах.

При изучении многоатомной молекулы основное внимание уделяется вопросам симметрии молекул и правилам отбора по симметрии. Это позволяет студенту по зарегистрированному спектру судить о строении молекулы, если он имеет в своем распоряжении зарегистрированные спектры ИК поглощения и комбинационного рассеяния.

Таким образом, целью курса является освоение основных закономерностей образования колебательных спектров молекул и использование их при прогнозировании новых квантовых генераторов на колебательных переходах.

В результате изучения учебной дисциплины «Атомная, молекулярная и лазерная спектроскопия» студент должен:

- **знать:** основные понятия спектрального анализа, различные виды спектрального анализа, источники возбуждения спектров и методами их регистрации; основные положения теории получения уровней энергии вращательных и колебательных движений в молекуле; получение спектров молекул (колебательных и вращательных двухатомных и многоатомных молекул)

- **уметь:** выбирать аналитический спектральный диапазон и аналитические спектральные линии; проводить калибровку спектрального диапазона, выбирать оптимальные параметры регистрации эмиссионных спектров; выбирать стандартные образцы для построения градуировочных графиков для количественного анализа многокомпонентных сплавов; оценить погрешность анализа и рассчитать коэффициент корреляции линейной аппроксимации и стандартное отклонение; рассчитывать молекулярные постоянные вращений и колебаний молекул; читать спектры на основании частот и молекулярных постоянных. Определять, какой молекуле принадлежит полученный спектр.

- **владеть** методами качественного, полуколичественного и количественного анализа многокомпонентных сплавов и растворов; основными принципами расчета колебательных и вращательных спектров молекул.

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Академические компетенции:

- Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.
- Владеть системным и сравнительным анализом.
- Владеть исследовательскими навыками.
- Уметь работать самостоятельно.
- Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).
- Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.
- Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.
- Обладать навыками устной и письменной коммуникации.

- Уметь учиться, повышать свою квалификацию в течение всей жизни.

Социально-личностные компетенции:

- Обладать качествами гражданственности.
- Быть способным к социальному взаимодействию.
- Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
- Владеть навыками здорового образа жизни.
- Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
- Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции:

- Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики и математики, современных технологий и материалов, наноматериалов и нанотехнологий, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин, методы автоматизации эксперимента, методов планирования, организации и ведения научно-производственной, научно-педагогической, производственно-технической, опытно-конструкторской работы.

- Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационные образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов, научное оборудование и аппаратуру.

- Проводить планирование и реализацию физического эксперимента, оценивать функциональные возможности сложного физического оборудования.

- Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, системами автоматизированного программирования, научно-технической и патентной литературой.

- Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования, планирования, организации и ведения научно-исследовательской, научно-производственной и научно-педагогической работы.

- Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационно-образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов.

- Оценивать конкурентоспособность и экономическую эффективность разрабатываемого программного обеспечения.

- Разрабатывать новые технологии и осуществлять оценку проектных и технологических решений с учетом принципов рационального природопользования и конъюнктуры рынка.

- Осуществлять на основе методов математического моделирования оценку эксплуатационных параметров оборудования и технологических процессов, эффективности разрабатываемых технологий.

- Реализовывать методы защиты производственного персонала и населения в условиях возникновения аварий, катастроф, стихийных бедствий и обеспечения безопасности при осуществлении научной, производственной и педагогической деятельности.
 - Владеть знаниями о структурной организации материи, о современных физических методах познания природы.
 - Использовать концептуальные положения педагогики и методики преподавания физики и информатики, методики воспитательной работы, технические средства обучения.
 - Применять психолого-педагогические знания, эффективные формы и методы обучения, новые технологии обучения.
 - Осуществлять поиск, систематизацию и анализ информации по перспективным направлениям развития отрасли, инновационным технологиям, проектам и решениям.
 - Определять цели инноваций и способы их достижения.
 - Применять знания физических основ современных технологий, средств автоматизации, методов планирования и организации производства, методы анализа и организации внедрения инноваций в научно-производственной, научно-педагогической и научно-технической деятельности, правового обеспечения хозяйственной деятельности и налоговой системы, современного предпринимательства, государственного регулирования экономики и экономической политики.
 - Пользоваться государственными языками Республики Беларусь и иными иностранными языками как средством делового общения.
- Общее количество часов, отводимое на изучение учебной дисциплины — 156, из них количество аудиторных часов — 78.
- Форма получения высшего образования — очная, дневная.
- Аудиторные занятия проводятся в виде лабораторных работ. Форма текущей аттестации по учебной дисциплине — зачет (4 зачетных единицы).

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. Спектральные приборы.

Понятие спектрального анализа и его виды. Физические основы атомно-эмиссионной спектроскопии. Оптическая схема спектрального прибора. Различные источники возбуждения спектров, приборы, применяемые для спектрального анализа, и их характеристики. Призмённые и дифракционные спектрометры. Методы регистрации спектров: визуальный, фотографический, фотоэлектрический. Устройства и оптическая схема монохроматора МДР-23. Регистрация спектра с помощью ПЗС-линейки.

2. Плазма электрических разрядов.

Определение и классификация различных типов плазмы; описание электрических источников возбуждения плазмы, и ее характеристик. Генератор дуги переменного тока, генератор высоковольтной

конденсированной искры. Спектральные методы определения температуры плазмы. Исследование зависимости температуры эрозионной плазмы от параметров электрического разряда и концентрации и теплофизических свойств анализируемых многокомпонентных сплавов.

3. Качественный и полуколичественный анализ сплавов.

Цели и задачи качественного и полуколичественного анализа. Качественный анализ медных, алюминиевых и железных сплавов. Подходы к полуколичественному анализу многокомпонентных сплавов. Метод усиления и появления спектральных линий. Анализ цветных сплавов на медной основе.

4. Количественный анализ сплавов.

Цели и задачи количественного анализа. Достоинства и недостатки безкалибровочного метода. Выбор стандартных образцов для количественного анализа многокомпонентных сплавов. Особенности построения градуировочных графиков для многокомпонентных сплавов с одним и двумя основными компонентами. Числовые критерии корректности линейной аппроксимации.

5. Лазерный микроанализ артефактов и предметов искусства.

Особенности лазерного микроанализа: калибровка спектрального диапазона и подготовка образцов к анализу. Особенности лазерной деструкции поверхности при возбуждении спектров наносекундными лазерными импульсами. Лазерный микроанализ ювелирных украшений, предметов искусства, монет и артефактов.

6. Лазерный анализ пористых материалов и биообъектов.

Лазерная абляция пористых материалов и биообъектов: особенности пробоподготовки, выбор оптимальных параметров лазерного излучения, обеспечивающих минимальную деструкцию поверхности и минимальную погрешность анализа.

7. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.

Изучение устройства спектрофотометра 75 IR, порядка включения и работы на нем. Регистрация колебательно-вращательного спектра CO. Определение из спектра значения волновых чисел колебательно-вращательных полос (см⁻¹) Р- и R-ветвей спектра.

8. ИК-спектры поглощения многоатомных молекул.

Изучение ИК-прибора SPECORD 75 IR (UR 20). Получение и интерпретация ИК-спектров молекулы бензола (C₆H₆).

9. Интерпретация электронного спектра поглощения бензола.

Изучение автоматического спектрофотометра М-40. Получение электронного спектра бензола в УФ-области спектра.

10. Спектроскопия комбинационного рассеяния света твердых тел.

Изучение прибора ДФС-52 и порядка работы на нем. Запись спектра кристаллов Na₂SO₄ и NaNO₃. Отнесение частот по типам колебаний. Сравнение полученных данных с литературными.

11. Спектроскопия комбинационного рассеяния света жидкостей.

Запись спектр КР бензола. Оценка степени деполяризации линий КР. Расчет числа колебаний молекулы бензола, исходя из группы симметрии D_{6h} . Правила отбора для линий КР бензола. Сравнение экспериментальных данных с теоретически рассчитанными.

12. Калибровка щелевых спектрометров и спектрофотометров.

Задание программы на компьютере для регистрации спектра поглощения на спектрофотометре SPECORD M-40. Установка необходимого спектрального диапазона частот. Регистрация спектров поглощения бихромата калия, хромово-кислого калия. Установка необходимого спектрального диапазона частот на спектрофотометре SPECORD IR-75. Регистрация спектров поглощения.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Литература	Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное			
1	2	3	4	5	6	7		8	9
1	Спектральные приборы				8			[1], [2]	Устный опрос
2	Плазма электрических разрядов				6			[1], [2], [3]	Устный опрос
3	Качественный и полуколичественный анализ сплавов				6			[1], [2], [3]	Устный опрос
4	Количественный анализ сплавов				6			[3], [4]	Устный опрос
5	Лазерный микроанализ артефактов и предметов искусства				6			[5], [6]	Устный опрос
6	Лазерный анализ пористых материалов и биообъектов				6			[5], [6]	Устный опрос
7	Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул				6			[7], [8]	Устный опрос
8	ИК-спектры поглощения многоатомных молекул				6			[8], [9]	Устный опрос
9	Интерпретация электронного спектра поглощения бензола				6			[8], [9]	Устный опрос
10	Спектроскопия комбинационного рассеяния света твердых тел				6			[9], [10]	Устный опрос

11	Спектроскопия комбинационного рассеяния света жидкостей				8			[9], [10]	Устный опрос
12	Калибровка щелевых спектрометров и спектрофотометров				8			[11], [12], [13]	Устный опрос
	Всего				78				Зачет

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Зажогин, А.П. Атомный спектральный анализ/ А.П. Зажогин. – Минск: БГУ, 2005. – 163 с.
2. Бураков, В.С. Практическое руководство по спектральному анализу/ В.С. Бураков, А.А. Янковский. – Минск: Изд-во АН БССР, 1960. – 232 с.
3. Зайдель, А.Н. Техника и практика спектроскопии/ А.Н. Зайдель, Г.В. Островская, Ю.И. Островский. – Москва: Наука, 1972. – 376 с.
4. Барсуков, В.И. Атомный спектральный анализ/ В.И. Барсуков. – Москва: Машиностроение-1, 2005. – 132 с.
5. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS): Fundamentals and Applications/ A.W. Miziolek, V. Palleschi, I. Schechter (Eds.). – Cambridge: Cambridge University Press, 2006. – 620 p.
6. Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy/ D.A. Cremers, L.J. Radziemski. – New York: John Wiley and Sons, 2006. – 264 p.
7. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., ГИФМЛ.1962.
8. Г. Гецберг. Спектры и строение двухатомных молекул М., Мир. 1949.
9. К. Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. М.Мир. 1985.
10. Применение спектров комбинационного рассеяния. М. Мир. 1977 С.145-354.
11. Cole A. R. H., Tables of Wavenumbers for the Calibration of Infra-red Spectrometers, 2nd ed., Pergamon Press, Oxford, 1977.
12. Колебательная спектроскопия. Современные воззрения. Тенденции развития. Пер. с англ./Под ред. А. Барнса, У. орвилл-Томаса. – М.:Мир, 1981, с.54.
13. Белл Р. Введение в фурье-спектроскопию. Пер. с англ. – М.:Мир, 1975.

Перечень дополнительной литературы

1. Чернетский, А.В. Введение в физику плазмы/ А.В. Чернетский. – Москва: Атомиздат, 1969. – 303 с.
2. Грим, Г. Спектроскопия плазмы/ Г. Грим. – Москва: Атомиздат, 1969. – 452 с.
3. Методы спектрального анализа/ А.А. Бабушкин [и др.]. – Москва: Изд-во МГУ, 1972. – 510 с.
4. Волькенштейн М.В., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И. Колебания молекул. М.: Изд-во Наука, 1972, 699 с.
5. Каплан И.Г. Симметрия многоэлектронных систем. М.: Изд-во Наука, 1969, 407 с.

6. Драго Р. Физические методы в неорганической химии. М.: Изд-во Мир, 1967. 464 с.
7. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М.: Изд-во Мир, 1969, стр.772.
8. Марфунин А.С. Введение в физику минералов. М.: Изд-во Недра, 1974, 324 с.
9. Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. М.: Изд-во Мир, 1966, 411 с.
10. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М.: Изд-во Мир, 1965, 216 с.
11. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. М.: Изд-во Мир, 1968. 384 с.
12. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. М.: Изд-во Мир, 1966, 587 с.
13. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике. М.: ГИТЛ., 1957, 354 с.
14. Александров П.С. Введение в теорию групп. М.: ГИФМЛ, 1980, 143 с.

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Устные опросы.

Примерный перечень вопросов для проведения устных опросов

1. Физические основы атомно-эмиссионного спектрального анализа.
2. Основные характеристики оптических схем спектральных приборов.
3. Оптические схемы ИСП-30, ДФС-452, МДР-23.
4. Основные характеристики плазмы.
5. Плазма электрических разрядов.
6. Электрические схемы высоковольтной конденсированной искры, дуги постоянного и переменного тока.
7. Задачи качественного, полуколичественного и количественного анализа.
8. Методы полуколичественного анализа веществ.
9. Преимущества и недостатки безэталонных методов анализа.
10. Особенности построения градуировочных графиков для количественного анализа.
11. Двухатомная молекула как жесткий ротатор (вращательные степени свободы молекулы, энергия вращения молекулы).

12. Вращательная энергия в классической физике.
13. Момент инерции двухатомной молекулы.
14. Квантование момента количества движения двухатомной молекулы.
15. Вращательная энергия двухатомной молекулы в квантовой механике.
16. Число колебательных степеней свободы многоатомной молекулы.
17. Колебания многоатомной молекулы в классической механике. Нормальные колебания.
18. Колебания многоатомной молекулы в квантовой механике.
19. Форма нормальных колебаний.
20. Симметрия молекул. Элементы симметрии.
21. Точечные группы симметрии молекул.
22. Строение и свойства молекулы бензола.
23. Валентные электроны в молекуле и природа химических связей в бензоле.
24. Законы поглощения света многоатомной молекулой. Коэффициент молярной экстинкции.
25. Правила отбора в электронных спектрах многоатомных молекул.
26. Принцип Франка-Кондона для многоатомных молекул.
27. Поляризуемость молекулы.
28. Величина индуцированного электрического момента молекулы.
29. Как получается спектр КР с точки зрения классической физики.
30. Стоксовы и антистоксовы компоненты КР.
31. Интенсивности линий КР.
32. Отличие спонтанного КР от резонансного КР.
33. Тензор поляризуемости молекулы.
34. Комбинационное рассеяние и квантовая механика. Получение стоксовых и антистоксовых компонент.
35. Правила отбора для спектра спонтанного КР.

Методические рекомендации по организации и выполнению самостоятельной работы студентов

Основой методики организации самостоятельной работы студентов по курсу является предоставление студентам необходимой для работы информации, а также обеспечение регулярных консультаций преподавателя и периодичной отчетности по различным видам учебной и самостоятельной деятельности.

В открытом доступе для студентов размещается следующая информация:

- программа курса с указанием основной и дополнительной литературы;
- учебно-методические материалы;
- график консультаций преподавателя;
- вопросы для проведения зачета.

Рекомендации по контролю качества усвоения знаний и проведению аттестации

Для текущего контроля качества усвоения знаний по лаборатории специализации рекомендуется использовать устные опросы. Устные опросы проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на устный опрос по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за устные опросы, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно.

Оценка каждого из устных ответов проводится по десятибалльной шкале. Оценка текущей успеваемости рассчитывается как среднеарифметическая оценок за устные ответы. Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме зачета, к зачету допускаются студенты, чья оценка текущей успеваемости не менее 4 баллов.

**ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
С ДРУГИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ СПЕЦИАЛЬНОСТИ**

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Молекулярная спектроскопия и люминесценция	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол №12 от 26.05.2017)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**
на 20__/20__ учебный год

№№ пп	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
теоретической физики астрофизики
(протокол № ____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой
теоретической физики и астрофизики
д.ф.-м.н., профессор

_____ Е.С. Воропай

УТВЕРЖДАЮ
Декан физического факультета
д.ф.-м.н., профессор

_____ В.М. Анищик