

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Л. Толстик

(подпись) (И.О.Фамилия)

27.09.2012г.

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 8278 /баз.

ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНУЮ СПЕКТРОСКОПИЮ

(название дисциплины)

Учебная программа для специальности:

1- 31 04 01 – Физика

(код специальности) (наименование специальности)

(1-31 04 01-01 научно-исследовательская деятельность)

(1-31 04 01-02 научно-производственная деятельность)

2012 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

А.И. Комяк – профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор физики.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.Л. Толстик – проректор по учебной работе Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор.

Д.С. Умрейко – гл. научный сотрудник НИИ ПФП им. А.Н. Севченко, доктор физико-математических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета (протокол № 12 от 20 апреля 2012);

Учебно-методической комиссией физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 9 от 15.05 2012 г.).

Рассмотрена научно-методическим советом Белорусского государственного университета (протокол № 5 от 28.05 2012 г.).

Ответственный за редакцию: **А.И. Комяк**

Ответственный за выпуск: **А.И. Комяк**

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Молекулярная спектроскопия как наука в последние десятилетия достигла высокого совершенства благодаря внедрению новых приборов и исследовательских комплексов, с помощью которых можно получать спектры с высоким временным и спектральным разрешением. Это позволяет более глубоко изучать строение и свойства вещества, обнаруживать малое содержание различных примесей при получении особо чистых веществ. Поэтому начальное знакомство с методами спектроскопии, возможностями и способами спектроскопического изучения вещества является необходимым элементом для глубокой подготовки оптика-инженера и оптика-исследователя.

Таким образом, целью предлагаемого курса является освоение фундаментальных основ получения и анализа спектров простейших молекул. Образование уровней энергии, вероятности оптических переходов, которые формируют интенсивности линий спектров, различные выражения для закона поглощения электромагнитной радиации, как вынужденного процесса, Все эти сведения можно получить при изучении предлагаемого курса. Материал курса основывается на базовых знаниях, полученных студентами при изучении общих курсов оптики, атомной физики и спектроскопии, квантовой механики и молекулярной физики.

Программа курса рассчитана на 18 часов лекций, и 4 часа самостоятельной работы студента. Форма отчетности – зачет.

ПРИМЕРНЫЙ ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№п/п	Название темы	Количество часов				
		Аудиторные				Самост. работ
		Лекции	Практич., семинар.	Лаб. занят.	КСР	
1.	Основные понятия и законы молекулярной спектроскопии	2	0	0		2
2.	Вращательные спектры двухатомных молекул	2	0	0		3
3.	Вращательные спектры многоатомных молекул	4	0			5
4.	Колебания двухатомной молекулы	2	0	0	2	2
5.	Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул	2	0	0		4
6.	Колебания многоатомной молекулы	6	0	0	2	8

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. **Основные понятия и законы.** Вопросы, решаемые молекулярной спектроскопией. Единицы измерения энергии в спектроскопии. Виды спектров молекул. Их общие и отличительные признаки. Населенность энергетических уровней. Уровни энергии – дискретные и сплошные. Вероятности оптических переходов. Ширина линий и полос в спектрах. Естественная ширина линий в спектрах. Соотношение неопределенности. Уширение линий. Коэффициенты Эйнштейна и вероятности переходов в поглощении и испускании. Моделирование процессов испускания и поглощения света в молекулах. Молекула как классический гармонический осциллятор. Закон поглощения света. Силы осцилляторов электронных переходов в молекулах.

2. **Вращательные спектры двухатомных молекул.** Вращение двухатомной молекулы как жесткого ротатора. Правила отбора и спектр жесткого ротатора. Нахождение молекулярных постоянных по спектру жесткого ротатора. Нежесткий ротатор, спектр нежесткого ротатора

3. Вращательные спектры многоатомных молекул. Моделирование многоатомной молекулы симметричными и асимметричными волчками. Спектры инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР) как жестких, так и нежестких волчков. Применение вращательных спектров молекул для определения внутримолекулярных постоянных (длин химических связей).

4. Колебания двухатомной молекулы. Двухатомная молекула как гармонический осциллятор. Уровни энергии и спектр гармонического осциллятора. Двухатомная молекула как ангармонический осциллятор. Уровни энергии ангармонического осциллятора и его спектр. Двухатомная молекула как гармонический осциллятор в квантовой механике. Правила отбора в спектре гармонического и ангармонического квантового осциллятора.

5. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Совместное рассмотрение колебаний и вращений двухатомной молекулы. Уровни энергии и спектры. Населенность уровней энергии и правила отбора в спектрах. Колебательно-вращательные спектры ИК - поглощения и КР. Вращательные ветви в колебательных спектрах молекул. Интенсивность линий в ветвях.

6. Колебания многоатомной молекулы. Колебания многоатомной молекулы в классической и квантовой механике. Нормальные колебания молекулы. Уравнение Шредингера для колебаний молекулы. Число колебаний в многоатомной молекуле. Силовые постоянные и частоты колебаний. Симметрия молекулы. Число колебаний различных типов симметрии. Точечные группы симметрии молекул, элементы симметрии. Характеристические частоты колебаний молекулы и их применение в структурном анализе.

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рекомендуемые темы лабораторных занятий

1. Определение равновесных расстояний в двухатомных молекулах с помощью колебательно-вращательных спектров.

2. Инфракрасные спектры молекул. Инфракрасные спектры бензола и некоторых анионов типа NO_3^- и SO_4^{2-} .

3. Спектры комбинационного рассеяния жидкостей (на примере бензола и четыреххлористого углерода).

4. Электронные спектры ароматических молекул. Интерпретация электронно-колебательного спектра бензола.

5. Электронные спектры поглощения красителей. Сила осциллятора электронного перехода.

Рекомендуемые темы для самостоятельной работы.

1. Правило отбора в электронно-колебательных спектрах многоатомной молекулы.

2. Интенсивность полос в электронных спектрах молекул.

3. Электронные спектры поглощения свободных молекул. Квазилинейчатые спектры.

4. Влияние агрегатного состояния вещества на его электронно-колебательный спектр.

Рекомендуемые темы для самостоятельной работы

1. Уровни энергии молекулы и ее спектр.

2. Спектры поглощения молекулы. Сила осциллятора электронного перехода.

3. Вращательный спектр двухатомной молекулы HCl . Вращательные постоянные этой молекулы.

4. Симметрия многоатомной молекулы. Элементы симметрии и операции симметрии.

5. Колебательно-вращательные спектры двухатомной и многоатомной молекулы.

Рекомендуемые темы контрольных работ (рефератов)

1. Вращательный спектр молекулы CO . Определение равновесных расстояний двухатомных молекул из вращательных спектров.

2. Колебание двухатомной молекулы как ангармонического осциллятора. Спектр ангармонического осциллятора.

3. Расчет числа нормальных колебаний многоатомной молекулы (H_2O).

4. Расчет числа колебаний определенных типов симметрии для ионов NO_3^- и SO_4^{2-} .

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. К. Бенуэлл . Основы молекулярной спектроскопии. М., «Мир», 1985
2. А.И.Комяк. Молекулярная спектроскопия. Мн., Изд. БГУ, 2005
3. К.Наканиси. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М., «Мир», 1965

Дополнительная

1. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Изд. ФМЛ, 1962
2. М.В. Волькенштейн, Л.А.Грибов, М.А.Ельяшевич,, Б.И.Степанов. Колебания молекул. М., Наука, 1972
3. Б.И.Степаноав. Введение в современную оптику. Поглощение и Испускание света квантовыми системами. Мн., Изд. «Наука и техника», 1991.