

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным инновациям


_____ О.И. Чуприс
(подпись)
16.07.2018
_____ (дата утверждения)

Регистрационный № УД 5864 /уч.

СПЕКТРЫ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальностей
1- 31 04 01 Физика (по направлениям)
направление 1-31 04 01-01 Физика
(научно-исследовательская деятельность)**

2018 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 04 01-2013, учебных планов № G31-214/уч., G31и-215/у. от 20.02.2018 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Л.С. Ляшенко — доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.);

Научно-методическим Советом Белорусского государственного университета (протокол № 7 от 13 июля 2018 г.).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа учебной дисциплины "Спектры и строение молекул" разработана для специальности 1- 31 04 01 Физика (по направлениям) направления специальности 1-31 04 01-01 Физика (научно-исследовательская деятельность).

Цель учебной дисциплины – формирование у студентов знаний по теоретическим основам молекулярной спектроскопии, необходимым для осознанного и грамотного применения развитого арсенала методов изучения строения молекул, а также о разнообразных современных спектрально-аналитических методах, обладающих широкой областью практических приложений.

Основная задача учебной дисциплины - изучение студентами важнейших фундаментальных вопросов молекулярной спектроскопии (формирование вращательных, колебательных, электронных спектров молекул в связи с их структурой и динамикой процессов, протекающих в молекулярных системах), с современными экспериментальными методами молекулярной спектроскопии и общими принципами ее практических приложений.

Успехи в развитии теоретических представлений о строении молекул неразрывно связаны с прогрессом в области спектроскопии молекул. Молекулярная спектроскопия, наряду с фундаментальными аспектами, состоящими в установлении связи строения вещества и процессов его взаимодействия с электромагнитным излучением, проявляющихся в наблюдаемых спектроскопических характеристиках, является мощным инструментом прикладных исследований, включающих чрезвычайно широкие области практических приложений в промышленности, химии, биологии, медицине, экологии и других сферах.

Сложившаяся в Беларуси структура научных направлений, в которой общепризнанно особое место занимают исследования в области оптики, спектроскопии, лазерной физики, а также развитость наукоемких отраслей промышленности, таких как оптико-механическая промышленность, оптико-электронное приборостроение, производство спектрально-аналитических приборов для научных исследований, делает целесообразным акцентирование внимания в профессиональной подготовке физиков на областях, связанных с оптикой, спектроскопией, включая молекулярную спектроскопию.

В процессе изучения дисциплины углубляются и развиваются представления, основы которых получены из разделов дисциплин общей физики («Оптика», «Атомная физика» и др.). Сведения, полученные в ходе изучения дисциплины, важны для более глубокого и качественного усвоения, как специальных дисциплин, так и дисциплин специализации (в области лазерной физики, биофизики, экологических, метрологических, аналитических направлений). В процессе изучения дисциплины на конкретных примерах закрепляются квантово-механические

представления, полученные в дисциплинах общей физики и параллельно читаемой теоретической дисциплине.

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать:

- теоретические основы формирования вращательных, колебательных и электронных спектров молекул разной степени сложности;
- закономерности в спектральных, кинетических и поляризационных характеристиках люминесценции;
- методы измерения электронных, колебательных спектров поглощения и люминесценции;
- методы получения информации об энергетических, структурных и динамических характеристиках молекулярных систем.

уметь:

- анализировать взаимосвязь между строением молекулярных систем и их спектральными характеристиками, а также характеристиками люминесценции;
- использовать спектрально-люминесцентные характеристики вещества для получения информации о процессах, протекающих в молекулярных системах.

владеть:

- совокупностью методов качественного и количественного определения молекулярного состава вещества.

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:

- Быть способным к социальному взаимодействию.
- Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
- Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
- Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции:

- Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики и математики, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин, методы автоматизации эксперимента.
- 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 используя квантово-механические методы.
- Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, научно-технической и патентной литературой.
- Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования.
- Применять знания физических основ современных технологий, методы внедрения инноваций в научно-производственной, научно-педагогической и научно-технической деятельности.

Дисциплина «Спектры и строение молекул» относится к циклу специальных дисциплин компонента УВО.

Программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями образовательных стандартов. Общее количество часов — 96; аудиторное количество часов — 36, из них: лекции — 30, управляемая самостоятельная работа (УСР) студентов — 6. Форма отчётности — экзамен. Форма получения высшего образования – очная, дневная. Занятия проводятся на 4-ом курсе в 7-ом семестре. Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – экзамен (2,5 зачетные единицы).

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. Общие вопросы спектроскопии. Введение. Предмет дисциплины. Связь строения молекул и их спектроскопических характеристик. Задачи молекулярной спектроскопии. Информация, получаемая при исследовании спектров молекул. Разделение видов движений в молекуле. Адиабатическое приближение. Уровни энергии (энергетический спектр) молекулы. Электронные, колебательные и вращательные уровни. Единицы измерения в спектроскопии. Спектральные области. Типы переходов и виды спектров молекул. Населенность уровней энергии Равновесная населенность для уровней различной природы. Вероятности переходов Коэффициенты Эйнштейна. Матричный элемент перехода. Мощность поглощения и испускания. Коэффициент поглощения, пропускание, оптическая плотность.

2. Вращение молекул и вращательные спектры.

Общая характеристика вращения молекул. Моменты инерции. Квантование момента импульса. Линейные молекулы, сферические, симметричные и асимметричные волчки. Вращательные уровни и переходы для линейной молекулы. Вращательные уровни молекул типа сферического и симметричного волчка. ИК и КР - спектры. Вращательный спектр и геометрические параметры молекулы.

3. Колебания двухатомной молекулы.

Зависимость электронной энергии от межъядерного расстояния - потенциальная функция для колебательного движения. Гармонические колебания двухатомной молекулы. Колебательные волновые функции. Ангармоничность колебаний. Энергия диссоциации. Функция Морза. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Обертоны и спутники. Вращательная структура колебательных полос.

4. Колебания многоатомных молекул.

Общая характеристика нормальных колебаний. Классификация нормальных колебаний по форме. Вид потенциальной энергии и выбор колебательных координат. Метод решения задачи о нормальных колебаниях. Интенсивности в колебательных спектрах. Характеристичность в колебательных спектрах.

5. Электронное строение и химическая связь в молекулах.

Характеристика отдельных электронов в атоме и молекуле. Молекулярные орбитали. Химическая связь в двухатомной молекуле. Метод молекулярных орбиталей. Электронные конфигурации двухатомных молекул. Химическая связь в многоатомной молекуле Локализованные и нелокализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.

6. Электронные состояния и спектры двухатомных молекул.

Классификация многоэлектронных состояний двухатомных молекул. Правила отбора. Электронно-колебательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона. Классическая и квантово-

механическая трактовка. Вращательная структура электронно-колебательных полос.

7. Характеристика электронных состояний и переходов в спектрах многоатомных молекул.

Электронные конфигурации многоатомных молекул. Типы переходов. Электронно-колебательные спектры поглощения и испускания многоатомных молекул.

8. Динамика процессов в возбужденных состояниях молекул.

Излучательные и безызлучательные переходы. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Колебательное перераспределение и колебательная релаксация. Энергетические и кинетические характеристики люминесценции.

9. Межмолекулярные взаимодействия и их спектроскопические проявления.

Ориентационные, индукционные и дисперсионные взаимодействия. Спектральные сдвиги, обусловленные межмолекулярными взаимодействиями. Динамика и флуктуации межмолекулярных взаимодействий.

10. Методы классической и лазерной молекулярной спектроскопии.

Инфракрасная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния. Принципы методов, примеры современной аппаратурной реализации и практических применений. Лазерная спектроскопия молекул (абсорбционная, флуоресцентная, оптико-акустическая спектроскопия, методы нелинейной спектроскопии, спектроскопия высокого временного разрешения).

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	9	
1	Общие вопросы спектроскопии	4						Устный опрос
2	Вращение молекул и вращательные спектры	2						Устный опрос
3	Колебания двухатомной молекулы	4						Устный опрос
4	Колебания многоатомных молекул	4					2	Устный опрос Контрольная работа
5	Электронное строение и химическая связь в молекулах	4						Устный опрос
5	Электронные состояния и спектры двухатомных молекул	2						Устный опрос
6	Характеристика электронных состояний и переходов в спектрах многоатомных молекул	4					2	Устный опрос Контрольная работа
7	Динамика процессов в возбужденных состояниях молекул	2						Устный опрос
8	Межмолекулярные взаимодействия и их спектроскопические проявления	2					2	Устный опрос Коллоквиум
9	Методы классической и лазерной молекулярной спектроскопии	2						Устный опрос
	Всего	30					6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Комяк А.И. Молекулярная спектроскопия. Мн.: БГУ. 2015.
2. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М.: Мир. 1985
3. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Л.: ЛГУ. 1987.
4. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия. М.: МГУ. 1980.
5. Левшин Л.В., Салецкий А.М. Люминесценция и ее измерение. М.: МГУ. 1989.
6. Гулис И.М. Лазерная спектроскопия. Курс лекций. Мн.: БГУ. 2002.
7. Гулис И.М., Комяк А.И. Люминесценция. Мн., БГУ, 2009.

Перечень дополнительной литературы

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: ГИФМЛ. 1962.
2. Майер Г.В., Данилова В.И. Квантовая химия, строение и фотоника молекул. Томск: ТГУ. 1984.
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. Школа. 1997.
4. Грей Г. Электроны и химическая связь. М.: Мир. 1967.
5. Демтредер В. Лазерная спектроскопия. М.: Наука. 1985.
6. Паркер С. Фотолюминесценция растворов. М., Мир, 1972

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Контрольная работа.
2. Коллоквиум.
3. Устные опросы.

Примерный перечень заданий УСР

1. Колебания многоатомных молекул.
2. Характеристика электронных состояний и переходов в спектрах многоатомных молекул.
3. Межмолекулярные взаимодействия и их спектроскопические проявления.

Мероприятия для контроля управляемой самостоятельной работой

Для контроля УСР используются проверки контрольные работы и коллоквиум.

Примерный перечень тем контрольной работы № 1

1. Каково соотношение между величинами колебательной, электронной и вращательной энергий молекулы?
2. Рассчитайте частоту первых трех линий во вращательном спектре комбинационного рассеяния двухатомной молекулы. (Даны массы атомов, межъядерное расстояние и частота возбуждения).
3. Как перераспределяется населенность колебательных состояний с ростом температуры?
4. Чем обусловлено некоторое схождение линий R-ветви колебательной полосы по мере удаления от частоты чисто колебательного перехода?
5. Каким образом из спектральных измерений могут быть определены геометрические характеристики молекул?

Примерный перечень тем контрольной работы № 2

1. Укажите типичное соотношение энергий для σ , π , δ -орбиталей.
2. Сформулировать принцип Франка-Кондона в классической интерпретации.
3. Что такое локализованные молекулярные орбитали?
4. Как изменяется плотность колебательных подуровней многоатомной молекулы с ростом колебательной энергии? Пояснить причину.
5. Распределить электроны на МО для молекулы N_2 .

Примерный перечень тем коллоквиума

1. Адиабатическое приближение.
2. Уровни энергии (энергетический спектр) молекулы. Электронные, колебательные и вращательные уровни. Типы переходов и виды спектров молекул.
3. Вращательные уровни и переходы для линейной молекулы.
4. Вращательные уровни молекул типа сферического волчка.
5. Вращательные уровни молекул типа симметричного волчка.
6. Вращательный спектр и геометрические параметры молекулы.
7. Гармонические колебания двухатомной молекулы. Колебательные волновые функции.
8. Ангармоничность колебаний. Энергия диссоциации. Функция Морза.
9. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
10. Метод решения задачи о нормальных колебаниях.
11. Химическая связь в двухатомной молекуле. Метод молекулярных орбиталей.
12. Классификация многоэлектронных состояний двухатомных молекул. Правила отбора.
13. Электронно-колебательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.
14. Электронные конфигурации многоатомных молекул.

15. Динамика процессов в возбужденных состояниях молекул.
16. Ориентационные, индукционные и дисперсионные взаимодействия.
17. Инфракрасная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния.
18. Лазерная спектроскопия молекул.

Методика формирования итоговой оценки

Итоговая оценка формируется на основе:

1. Правил проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования (постановление Министерства Образования Республики Беларусь № 53 от 29 мая 2012 г);

2. Положения о рейтинговой системе оценки знаний студентов по дисциплине в Белорусском государственном университете (№ 382-ОД от 18.08.2015 г.);

3. Критериев оценки знаний и компетенций студентов по 10-балльной шкале.

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать устные опросы, контрольные работы и коллоквиум. Устные опросы проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить задания в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки, 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, контрольных работ и коллоквиума 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 УВО

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)
Физика лазеров	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г)
Молекулярная спектроскопия	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г)

