

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Л. Толстик

(подпись)

« 21 » *января* _____ 2017 г.

(дата утверждения)

Регистрационный № УД-5123 /уч.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Учебная программа учреждения высшего образования

по учебной дисциплине для специальностей:

1- 31 04 01 Физика (по направлениям)

Направление - 1-31 04 01-01 Научно-исследовательская деятельность

2017 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 04 01 -2013 и учебного планов № G31-163/уч. и G31 и-174/у.

СОСТАВИТЕЛЬ:

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

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии физики Белорусского государственного университета
(протокол № 6 от 6 декабря 2017);
Советом физического факультета
(протокол № 3 от 19 декабря 2017 г.)

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа учебной дисциплины «Молекулярная спектроскопия» разработана для специальности 1-31 04 01 - Физика (по направлениям) по специальности 1-31 04 01 –Физика (научно-исследовательская деятельность)

Учебной *целью* является освоение студентами фундаментальных основ поглощения света молекулами разнообразных структур и в различных агрегатных состояниях начиная от газов, жидкостей и оканчивая твердым телом (кристаллом).

Основная задача учебной дисциплины изучить основные закономерности, лежащие в основе поглощения света молекулой. Далее, как эти закономерности проявляются в различных типах электронных спектров – сплошных, полосатых, квазилинейчатых. Приводятся демонстрации различных спектров и рассматриваются физические причины, приводящие к различным типам спектров.

Спектроскопия молекул устанавливает ряд закономерностей между составом, структурой и свойствами изучаемых соединений. Поэтому овладение методами колебательной и электронной спектроскопии представляется необычайно важным элементом в подготовке высококвалифицированных специалистов по оптике, квантовой электронике и лазерной физике. Представляемая программа формирует знания по колебательной и электронной спектроскопии молекул. Основное внимание обращено на формирование молекулярного спектра. Для студента существенно важно умение читать спектр, т.е. полученные полосы или линии приписать определенной форме движения атомов в молекуле или внешних электронов на определенной молекулярной оболочке. Умение читать и интерпретировать молекулярные спектры – основная задача спецкурса. Знание спектра позволит специалистам - оптикам устанавливать состав и структуру соответствующих известных и неизвестных веществ. По незначительным изменениям в спектре молекулы можно судить о взаимодействии ее с окружением, что весьма существенно при изучении спектров конденсированного состояния.

Программа курса основывается на знаниях и представлениях, полученных при изучении курса «Оптические спектры атомов».

Программа курса рассчитана на 36 часов лекций и 4 часа УСР. Форма отчетности - экзамен.

В результате изучения дисциплины студент должен **знать**:

- основные законы поглощения света молекулой в различных агрегатных состояниях;
- характерные спектральные области, в которых проявляются электронные спектры поглощения;
- какие электроны участвуют в поглощении в той или иной области спектра;

– правила запрета переходов по дипольному моменту. Разрешенные и квазиразрешенные электронные переходы

– **уметь:**

– различать в спектрах чисто электронные и вибронные переходы;

– анализировать спектры по частотам и интенсивностям;

– рассчитывать силу осцилляторов электронных и вибронных переходов;

– обозначать электронные переходы, связанные с симметрией молекул и природой электронов, участвующих в поглощении

– **владеть:**

– методами распознавания спектров, принадлежащих к тем или иным группам молекул (газовая среда, жидкость, кристаллы) ;

– расчетом сил осцилляторов, характеризующих величину поглощения;

– умением различать типы спектров и соотносить их к соответствующим агрегатам состоянием 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, 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 используя квантово-механические методы.

– 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.

– 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.

Общее количество часов – 110, аудиторное количество часов – 40. Аудиторные занятия проводятся в виде лекций и семинарских занятий. На проведение лекционных занятий отводится – 36 часов, на УСП – 4 часа. Форма получения высшего образования – очная, дневная. Занятия проводятся на 4-ом курсе в 7-ом семестре. Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – экзамен (3 зачетных единицы).

По учебной дисциплине «Молекулярная спектроскопия» предусмотрены лабораторные работы: общее количество часов – 88, аудиторное количество часов – 48. Лабораторные занятия проводятся на 4-ом курсе в 7-ом семестре. Форма текущей аттестации по лабораторным занятиям – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. Электронные спектры двухатомных молекул.

Колебательная структура электронного спектра двухатомной молекулы. Система полос Деландера. Кривые потенциальной энергии верхнего и нижнего электронных состояний. Интенсивность колебательных полос. Принцип Франка-Кондона. Классический и квантово-механический варианты принципа Франка-Кондона. Расчет интенсивности электронно-колебательного перехода.

Химическая связь в двухатомной молекуле. σ - и π -связи в молекуле. Молекулярные электронные оболочки σ -связи в молекулах H_2 и He_2 . σ - и π -связи в многоэлектронных молекулах O_2 , N_2 , F_2 и др.

Метод молекулярных орбиталей (МО). Составление молекулярной орбитали из атомных орбиталей (МО = ЛКАО). Связывающие и разрыхляющие орбитали. Интегралы перекрывания. Энергия устойчивого состояния на примере молекулы водорода. Классификация электронных состояний двухатомной молекулы. Орбитальное квантовое число и мультиплетность электронных состояний. Молекулярные электронные оболочки, σ - и π -электроны. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Вращательные ветви электронно-колебательных полос (O-, P-, Q-, R-, S – ветви). Правила отбора в электронных спектрах двухатомных молекул. Различные типы связи вращательного движения с электронным. Примеры электронных спектров.

2. Электронные спектры поглощения многоатомных молекул.

Формирование спектра многоатомной молекулы. Различные подходы для классификации электронных состояний. Сплошные, полосатые и дискретные спектры молекул. Химические связи в многоатомных молекулах. Гибридизация атомных орбиталей в многоатомных молекулах. Метод МО (ЛКАО). Молекулярные орбитали в молекулах бензола и воды. Симметрия молекулярных орбиталей. Систематика электронных состояний в молекулах бензола и воды.

Принцип Франка-Кондона для многоатомной молекулы. Адиабатическое приближение. Отклонение от адиабатического приближения. Эффект Герцберга-Теллера. Электронные спектры молекул в кристаллических матрицах. Эффект Шпольского. Электрон-фононные взаимодействия. Электронные спектры поглощения ароматических молекул (бензол, нафталин, антрацен) в газовой фазе. Примеры и применения.

Электронные спектры поглощения растворов. Влияние межмолекулярных взаимодействий на спектры молекул. Универсальные и специфические взаимодействия в растворах. Модель Онзагера и эффективное поле, действующее на молекулу в среде.

3. Электронные спектры поглощения молекулярных кристаллов

Общие сведения о молекулярных кристаллах. Модель ориентированного газа. Расщепление электронных переходов в кристаллах бензола,

нафталина и антрацена. Эффект Давыдова. Понятие об экситоне. Экситон-фононные и виброн-фононные взаимодействия. Влияние температуры на электронные спектры поглощения.

4. Электронные спектры активированных кристаллов.

Активированные кристаллы. Ионы - активаторы с незаполненными d- и f- оболочками. Влияние кристаллического поля на величину расщепления d- и f- оболочек. Систематика электронных состояний ионов-активаторов. Спектры поглощения рубина и алюмоиттриевого граната. Применение указанных кристаллов в квантовой электронике.

5. Электронные спектры поглощения полупроводниковых кристаллов.

Энергетические зоны в полупроводниках. Спектры поглощения полупроводников при комнатной и низкой температурах. Экситоны Ванье-Мотта. Экситонное поглощение в полупроводниках. Экситон-фононное взаимодействие. Оптические и акустические фононы. Прямозонные и непрямозонные переходы.

7 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	Электронные спектры двухатомных молекул	8						Устный опрос
2	Электронные спектры поглощения многоатомных молекул	8						Устный опрос
3	Электронные спектры поглощения молекулярных кристаллов	8					2	Устный опрос, контрольная работа
4	Электронные спектры активированных кристаллов.	6						Устный опрос
5	Электронные спектры поглощения полупроводниковых кристаллов	6					2	Устный опрос, контрольная работа
6	Определение равновесных расстояний в двухатомных молекулах с помощью колебательно-вращательных спектров				8			Устный опрос
7	Инфракрасные спектры молекул. Инфракрасные спектры бензола и некоторых анионов типа NO_3^- и SO_4^{2-}				10			Устный опрос
8	Спектры комбинационного рассеяния жидкостей (на примере бензола и четыреххлористого углерода)				10			Устный опрос
9	Электронные спектры ароматических молекул. Интерпретация спектра бензола				10			Устный опрос
10	Электронные спектры поглощения красителей. Сила осциллятора электронного перехода				10			Устный опрос
	Всего	36			48		4	Экзамен, зачет

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Изд. ФМЛ, 1962
2. Г.Герцберг. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М. «Мир», 1969
3. А.И.Комяк. Молекулярная спектроскопия. Мн., Из-во БГУ, 2005
4. К.Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. М. «Мир», 1985.

Перечень дополнительной литературы

1. Спектры поглощения молекулярных кристаллов, Киев. Изд. «Наукова думка», 1965
2. Спектроскопия и динамика возбуждений в конденсированных молекулярных системах. (Под ред. Аграновича В.М. и Хохштрассера Р.М) М., Изд. «Наука», 1987
3. Н.А.Борисевич. Возбужденные состояния сложных молекул в газовой фазе. Мн., Изд. «Наука и техника», 1967
4. В.П.Грибковский. Теория поглощения и испускания света в полупроводниках. Мн., Изд «Наука и техника» , 1975.

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

Формы контроля знаний

1. Устные опросы.

Примерный перечень вопросов для проведения устных опросов

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.

Мероприятия для контроля управляемой самостоятельной работой

Для контроля УСР используются контрольные работы, которые выполняются в письменной форме.

Рекомендуемые темы контрольных работ

1. Распределение интенсивности по полносимметричным колебаниям в многоатомных молекулах.
2. Симметрия электронных состояний в молекулах бензола, нафталина и антрацена.
3. Экситонное расщепление электронных полос в кристаллах. Эффект Давыдова.
4. Экситоны Ванье-Мотта в полупроводниках. Экситонные спектры поглощения в полупроводниках.

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ И ВЫПОЛНЕНИЮ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Основой методики организации самостоятельной работы по курсу «Молекулярная спектроскопия» является предоставление необходимой информации студентам в виде заданий по рефератам, подготовка задач по курсу, проведения необходимых консультаций по выполнению заданий, проверка работ и их анализ совместно со студентами. Студентам предоставляется учебное пособие по курсу «Молекулярная спектроскопия» основная и дополнительная литература.

- учебно-методические материалы
- график консультаций преподавателя
- вопросы для проведения зачета и экзамена
- сроки проведения контрольных мероприятий
- перечень вопросов по контрольной работе и др.

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО КОНТРОЛЮ КАЧЕСТВА УСВОЕНИЯ ЗНАНИЙ И ПРОВЕДЕНИЕ АТТЕСТАЦИИ

Аттестация студентов по учебной дисциплине проводится в соответствии с правилами проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования (постановление Министерства Образования Республики Беларусь № 53 от 29 мая 2012 г.); Положением о рейтинговой системе оценки знаний студентов по дисциплине в Белорусском государственном университете (№ 382-ОД от 18.08.2015 г.); критериями оценки знаний и компетенций студентов по 10-бальной шкале.

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать устные опросы и контрольные работы. Устные опросы и контрольные работы 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 проводится по десятибалльной шкале. Оценка текущей успеваемости рассчитывается как среднеарифметическая оценок за устные ответы и контрольные работы. Аттестация по учебной дисциплине проводится в форме экзамена. Экзаменационная оценка и оценка текущей успеваемости служат для определения рейтинговой оценки по дисциплине, которая рассчитывается как средневзвешенная оценка текущей успеваемости и экзаменационной оценки. Весовой коэффициент для оценки текущей успеваемости – 0,4, для экзаменационной оценки – 0,6.

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

Название учебной 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)
Оптические спектры атомов	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 6 от 6 декабря 2017 г.)

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