

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор


/С.Н.Калмыков/
«30» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Лазерная спектроскопия атомов и молекул

Laser spectroscopy of atoms and molecules

Уровень высшего образования:

Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Физическая химия (104-01-00-144-хн-фмн)

Москва 2022

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Требованиями к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемыми Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова (приказ №1216 от 24 ноября 2021 г.).

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины – Лазерная спектроскопия атомов и молекул (*Laser spectroscopy of atoms and molecules*).

Цель изучения дисциплины – курс предназначен для аспирантов 2-го года обучения, состоит из двух разделов и знакомит слушателей с систематикой атомных и молекулярных спектров, схем связи для описания их состояний, а также систематикой разрешенных переходов в атомах и двухатомных молекулах, принципами работы лазеров и особенностями лазерного излучения важными для спектроскопических измерений, а также с некоторыми методами лазерной спектроскопии, как в прикладном контексте, так и в рамках научно-исследовательской деятельности.

2. Уровень высшего образования - подготовка кадров высшей квалификации

3. Научная специальность: **1.4.4** Физическая химия, область науки: 1. Естественные науки

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Обязательные Дисциплины (модули) – Обязательная дисциплина по выбору.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 68 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (64 часа – занятия лекционного типа, 4 часа – мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 4 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

6. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете на предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:

1. «Основы квантовой механики»
2. «Квантовая химия»
3. «Строение молекул»

7. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам:

Наименование и краткое содержание разделов и тем, форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	в том числе:								
		Контактная работа во взаимодействии с преподавателем, часы, из них						Самостоятельная работа, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Текущий контроль, проверка успеваемости, промежуточная аттестация	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка к коллоквиумам	Всего
Тема №1. Общие вопросы спектроскопии	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №2. Уровни энергии и спектры атома водорода и водородоподобных ионов. Тонкая и сверхтонкая структура.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №3. Многоэлектронные атомы и ионы. Оболочка, конфигурация, терм, полиада. Типы связи.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №4. Эквивалентные и неэквивалентные электроны. Смешанные конфигурации.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №5. Уровни энергии и спектры атомов с одним внешним s-электроном.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №6. Уровни энергии и спектры атомов с двумя внешними s-электронами.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №7. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися p-оболочками.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №8. Уровни энергии и спектры атомов инертных газов.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №9. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися d-оболочками.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №10. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися f-оболочками.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №11. Электронные состояния двухатомной молекулы.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-

Кривая потенциальной энергии.										
Тема №12. Молекулярные электронные оболочки. Электронные конфигурации, термы	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №13. Взаимодействие электронного движения с вращением молекулы. Типы связи.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №14. Правила отбора для переходов в дипольном приближении	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №15. Уровни энергии и спектры молекул H_2^+ , H_2 и H_2^- .	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Тема №16. Уровни энергии и спектры гомоядерных двухатомных молекул.	2	4	-	-	-	-	2	-	-	-
Тема №17. Уровни энергии и спектры гетероядерных двухатомных молекул.	2	2	-	-	-	-	2	-	-	-
Тема №18. Особенности строения трехатомных молекул, их электронные состояния и симметрия.	4	4	-	-	-	-	4	-	-	-
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	4	-	-	-	-	4		-	4	4
ИТОГО:	72	64	-	-	-	4	68	-	4	4

8. Образовательные технологии.

Проводятся лекции с использованием мультимедийной техники.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература:

1. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: УРСС, 2001.
2. В. Демтредер. Современная лазерная спектроскопия. М.: Издательский дом ИНТЕЛЛЕКТ, 2014.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика: в 10 т.: Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2016.

Дополнительная литература:

1. О. Звелто. Принципы лазеров. С-Пб.: Лань, 2008.
2. А.Б. Болотин, Н.Ф. Степанов. «Теория групп и ее применения в квантовой механике молекул». Вильнюс: Элком, 1999.
3. Хьюбер К.-П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. В двух томах / Под ред. д-ра физ.-мат. наук Н. Н. Соболева. М.: Мир, 1984.

Перечень используемых информационных технологий:

- База спектральных данных NIST <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>
- База спектральных данных Р. Куруца <https://www.cfa.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html>
- Константы двухатомных молекул. База ИФТАН: <http://www.ihed.ras.ru/cdmrus/>
- Учебно-методические материалы на сайте кафедры: <https://laser.chem.msu.ru/>

Описание материально-технической базы:

— занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным экраном.

11. Язык преподавания – русский
12. Преподаватели:

*к.х.н., доц., Попов Андрей Михайлович,
кафедра лазерной химии химического факультета МГУ,
e-mail: popov@laser.chem.msu.ru, тел.: 7 (495) 939-36-35*

**Фонды оценочных средств,
необходимые для оценки результатов обучения**

Контрольные вопросы для самостоятельной работы:

1. Уровни энергии и спектры атома водорода и водородоподобных ионов. Тонкая и сверхтонкая структура.
2. Многоэлектронные атомы и ионы. Оболочка, конфигурация, терм, полиада. Типы связи.
3. Эквивалентные и неэквивалентные электроны. Смешанные конфигурации.
4. Уровни энергии и спектры атомов с одним внешним s-электроном.
5. Уровни энергии и спектры атомов с двумя внешними s-электронами.
6. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися p-оболочками.
7. Уровни энергии и спектры атомов инертных газов.
8. Спектры атомов с достраивающимися d- и f-оболочками.
9. Электронные состояния двухатомной молекулы. Кривая потенциальной энергии.
10. Молекулярные электронные оболочки. Типы связи
11. Правила отбора для переходов в дипольном приближении.
12. Уровни энергии и спектры молекул H_2^+ , H_2 , H_2^- .
13. Уровни энергии и спектры гомоядерных двухатомных молекул.
14. Уровни энергии и спектры гетероядерных двухатомных молекул.

Перечень вопросов к зачету:

1. Уровни энергии и спектры гетероядерных двухатомных молекул.
2. Определите наиболее глубокий терм в LS-связи электронной конфигурации g^2 .
3. Молекулярные электронные оболочки. Типы связи.
4. Приведите термы в LS-связи для электронной конфигурации d^2p^3 , приведите примеры частиц, для которых реализуется такой тип связи.
5. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися p-оболочками.
6. Приведите термы в jj-связи для электронной конфигурации p^2 , приведите примеры частиц, для которых реализуется такой тип связи.
7. Уровни энергии и спектры атома водорода и водородоподобных ионов. Тонкая и сверхтонкая структура.
8. Молекула N_2 : изобразите возможные электронные состояния, переходы между электронными состояниями и назовите основные серии полос.
9. Многоэлектронные атомы и ионы. Оболочка, конфигурация, терм, полиада. Типы связи.
10. Эксиммерные лазеры на молекулах NeF , ArF , KrF , XeF отличаются длиной волны лазерной генерации. Исходя из электронной структуры этих эксимерных молекул, определите в каком направлении изменяется эта линия генерации.
11. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися d- и f-оболочками. Особенности структуры уровней лантанидов.
12. Молекула CO : изобразите возможные электронные состояния, переходы между электронными состояниями и назовите основные серии полос.
13. Уровни энергии и спектры атомов инертных газов. Какой тип связи используется для их описания.
14. Сравните электронные состояния, устойчивость, спектры молекул H_2^+ , H_2 , H_2^- .
15. Эквивалентные и неэквивалентные электроны в атомах и молекулах. Смешанные конфигурации.

16. Определите какие электронные состояния молекулы FeO могут получиться из основных состояний атомов Fe (5D) и O (3P).

**Методические материалы
для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Зачет проходит по билетам, включающим 3 вопроса – 2 теоретических вопроса и пример спектра, по которому следует определить переход, к которому относится спектр, а также возможную частицу. Уровень знаний аспиранта оценивается по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже, чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

Шкала оценивания знаний, умений и навыков

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка/ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач