



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
**«Дальневосточный федеральный университет»**  
(ДВФУ)

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

«СОГЛАСОВАНО»

Руководитель ОП

(подпись)

Голик С.С.

«УТВЕРЖДАЮ»



Заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики

Короченцев В.В.

2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
Электронная спектроскопия  
Направление подготовки – **03.03.02 Физика**  
Экспериментальная физика  
**Форма подготовки очная**

курс 4 семестр 8

лекции 24 час.

практические занятия не предусмотрены

лабораторные работы 24 час.

в том числе с использованием МАО лек. \_\_\_ /пр. \_\_\_ час.

всего часов аудиторной нагрузки 48 час.

в том числе с использованием МАО \_\_\_ час.

самостоятельная работа 60 час.

в том числе на подготовку к экзамену: 36 час.

контрольные работы не предусмотрены

курсовая работа не предусмотрена

зачет не предусмотрен

экзамен 8 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно установленного ДВФУ, утвержденного приказом ректора от 07.07.2015 № 1282

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей и экспериментальной физики, протокол № 8 от «27» 05 2019 г.

Заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики В.В. Короченцев  
Составитель: Ширмовский С.Э. к.ф.-м. н., доцент

**Владивосток**  
**2019**

**Оборотная сторона титульного листа РПУД**

**I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:**

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

**II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:**

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

## АННОТАЦИЯ

Рабочая программа дисциплины «Атомная электронная и колебательная спектроскопия» разработана для студентов 4 курса направления 03.03.02 «Физика», профиль «Экспериментальная физика» в соответствии с требованиями ОС ВО по данному направлению.

Дисциплина «Атомная электронная и колебательная спектроскопия» относится к разделу Б1.В.ДВ.06.02 дисциплин по выбору учебного плана.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 108 часов. Учебным планом предусмотрены лекционные занятия (18 часов), практические занятия (18 часов), самостоятельная работа студента (72 час.). Дисциплина реализуется на 4 курсе в 7 семестре.

Цель: Ознакомление с принципами атомной и молекулярной спектроскопии, с систематикой атомных и молекулярных спектров, изучение электронных состояний и химической связи в двухатомных и многоатомных молекулах, учет свойств симметрии равновесной конфигурации молекул при классификации колебаний по их симметрии, а также использование характеристичности колебаний для идентификации соединений.

Для освоения данной дисциплины требуются знания обучающегося, приобретенные при изучении общего курса физики, в частности, разделов Оптика, Атомная физика.

Для успешного изучения дисциплины «Атомная электронная и колебательная спектроскопия» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- готовность к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства (ОК-6);
- способность осознавать социальную значимость своей будущей профессии, демонстрировать высокую мотивацию к выполнению профессиональной деятельности (ОК-8);

В результате изучения данной дисциплины у студентов формируются следующие общекультурные/ общеобразовательные/ профессиональные компетенции (элементы компетенций).

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции
--------------------------------	--------------------------------

ПК-3 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	Знает	природу атомных и молекулярных спектров; обладать теоретическими знаниями об энергетических состояниях атомов, молекул и переходах между ними;
	Умеет	анализировать атомные спектры элементов Периодической системы Д.И. Менделеева; определять строение и параметры простых молекул из спектроскопических данных.
	Владеет	практическими навыками в области атомной и молекулярной спектроскопии, методами решения расчетных задач, связанных с изучением строения молекул и их электронных, колебательных и вращательных спектров, интерпретацией экспериментальных данных в оптической атомной и молекулярной спектроскопии
ПК-4 способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований		

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Атомная электронная и колебательная спектроскопия» предусмотрены следующие методы активного/интерактивного обучения: лекция-беседа; групповая консультация (для практических занятий).

## I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ

### Лекционные занятия (18 час)

#### **Тема 1. Спектр атома водорода и водородоподобных атомов.**

Спектр водорода. Уровни энергии атома. Спектральные термы. Диаграмма Гроттриана. Сериальные закономерности. Правила отбора. Серии Лаймана, Бальмера, Пашена. Тонкая структура спектра водорода. Лэмбовский сдвиг. Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек. Свойства элементов с заполненными и незаполненными оболочками.

#### **Тема 2. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Сложение орбитальных и спиновых моментов.**

Систематика спектров многоэлектронных состояний. лекционное занятие (4 часа(ов)): Периодичность свойств элементов. Спектры щелочных металлов и сходных с ними ионов. Спектры Ag, Cu, Au. Спектры щелочноземельных

элементов. Спектры Zn, Cd, Hg. Типы связи. Состояния эквивалентных электронов: 2 электрона, 3 электрона. Нормальное состояние атомов. Мультиплеты в спектрах.

**Тема 3. Спектры элементов с оболочками p, p<sub>2</sub>, p<sub>3</sub>, p<sub>4</sub>, p<sub>5</sub>, p<sub>6</sub> (инертные газы). Спектры элементов с достраивающимися d- и f-оболочками. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов между состояниями. Дипольное излучение. Сила осциллятора.**

Строение электронных оболочек Спектры элементов с одним и двумя p-электронами. Спектры элементов с тремя и большим числом p-электронов. Спектры атомов с замкнутой электронной оболочкой. Спектры атомов с достраивающейся d-оболочкой. Спектры элементов группы железа. Спектры элементов с достраивающейся f-оболочкой.

Описание излучения и поглощения света атомами с помощью вероятностей переходов. Интенсивность спектральных линий. Понятие силы осциллятора.

**Тема 4. Ширина уровней энергии и спектральных линий. Колебательная структура электронных полос. Вращательная структура электронных полос.**

Зависимость интенсивности спектральных линий от распределения молекул по энергетическим состояниям. Сумма по состояниям. Относительная заселенность колебательных уровней энергии. Относительная заселенность вращательных уровней энергии. Электронные переходы двухатомных молекул. Колебательная структура электронных полос. Серии Деландра. Распределение интенсивности в электронно-колебательных спектрах. Принцип Франка-Кондона. Вращательная структура электронного перехода. Образование канта. Оттенение полос. Диаграмма Фортра. Комбинационные соотношения. Определение вращательных постоянных.

**Тема 5. Принципы построения электронных конфигураций.**

Определение электронных состояний из разъединенных атомов. Определение молекулярных термов из состояний объединенного атома. Определение многообразия термов по электронной конфигурации.

**Тема 6. Многоатомные молекулы. Элементы симметрии и точечные группы симметрии молекул. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.**

Форма и размеры многоатомных молекул. Симметрия молекул и основы теории групп. Точечные группы низшей, средней и высшей симметрии. Общие выводы о симметрии молекулы. Вращение многоатомных молекул. Вращательные спектры линейных молекул. Молекулы типа сферического волчка. Молекулы типа симметричного и асимметричного волчка. Эффект Штарка.

**Тема 7. Колебательные спектры многоатомных молекул. Колебательная задача для молекул при учете свойств симметрии. Характеристичность колебаний многоатомных молекул.**

Нормальные колебания многоатомных молекул. Классификация нормальных колебаний многоатомных молекул по их форме. Классическое решение задачи о малых колебаниях многоатомных молекул. Квантовомеханическое решение колебательной задачи.

Общие принципы классификации колебаний по их симметрии. Координаты симметрии. Решение задачи о колебаниях молекул при учете свойств симметрии.

Понятие о характеристичности частот колебаний молекулярных фрагментов. Характеристические частоты ИК-поглощения основных классов соединений. Структурный молекулярный анализ по инфракрасному спектру поглощения.

**Тема 8. Электронные состояния многоатомных молекул** Электронные состояния и химическая связь в многоатомных молекулах. Валентность атома.  $sp$ -,  $sp^2$ ,  $sp^3$ -гибридизация орбиталей. Классификация электронных переходов. Типичные хромофоры. Применение электронных спектров поглощения.

**Тема 9. Спектры люминесценции.**

Классификация различных видов люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Спектральные закономерности молекулярной люминесценции. Кинетика люминесценции.

## **II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА (18 час.)**

- Сочетание информационных лекций с проблемными;
- Проведение проблемных семинаров;
- Использование интерактивных электронных учебных материалов на лекциях, семинарах и практических занятиях;
- Применение компьютерного моделирования результатов эксперимента

### **Темы семинаров**

1. Изучение спектра атома водорода и определение изотопического сдвига линий излучения
2. Визуализация спектральных линий излучения атомов ртути, натрия, кадмия и неона и их соответствие диаграммам уровней энергии Гротриана.
3. Периодичность свойств элементов. Спектры щелочных металлов и сходных с ними ионов. Спектры Ag, Cu, Au. Спектры щелочноземельных элементов. Спектры Zn, Cd, Hg.
4. Определение вращательных постоянных и межатомных расстояний двухатомных молекул по ИК-Фурье спектрам поглощения.
5. Определение молекулярных постоянных по электронным спектрам поглощения молекул.
6. Идентификация органических соединений по ИК-Фурье спектрам

## **III. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА**

Контрольные и методические материалы, а также критерии и показатели необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы представлены в Приложении 2.

## **IV. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Основная литература:**

1. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Под ред. проф. Ф.Ф. Литвина. - М.: НИЦ Инфра-М, 2013. - 263 с. // <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=352873>
2. Шпольский Э.В. Атомная физика, т.1. Введение в атомную физику. - СПб.: Издательство "Лань", 2010 // <http://e.lanbook.com/view/book/442/> 3. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов: Учебное пособие. - СПб.: Издательство "Лань", 2010. - 656 с. // <http://e.lanbook.com/view/book/625/>

### **Дополнительная литература:**

1. Теория оптических спектров : учебное пособие / А. М. Леушин ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. агентство по образованию, Казан. гос. ун-т. ? Казань : Изд-во Казанского государственного университета, Ч. 1: Классические методы .? 2007 .? 107 с.
2. Камалова Д.И. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии: учебное пособие / Д.И. Камалова, М.Х. Салахов. - Казань: Казанский государственный университет, 2009. -167 с.
3. Молекулярная спектроскопия биологических сред : учеб. пособие / В. М. Сидоренко .? М. : Высш. шк., 2004 .? 190 с.

### **Интернет-ресурсы:**

American Institute of Physics (AIP) - <http://scitation.aip.org/>

Elsevier (Science Direct) - <http://www.sciencedirect.com/>

Научная электронная библиотека - <http://www.elibrary.ru>

ЭБС ZNANIUM.COM - <http://znanium.com/>

Электронно-библиотечная система Издательства "Лан" - <http://lanbook.com/>

## **V. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

- Эффективное изучение курса предполагает регулярное посещение занятий и систематическое повторение материала, излагаемого преподавателем на лекции;
- Алгоритм изучения данной дисциплины состоит в методическом изучении материала курса его регулярном повторении в часы



самостоятельной работы, а так же посещение консультаций с преподавателем;

- Работа с указанной литературой должна осуществляться прежде всего в рамках лекционного курса;
- Подготовка к зачёту и экзамену должна проходить регулярно в течении семестров отведённых для занятий.

## **VI. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ**

При осуществлении образовательного процесса используются справочная систем электронных ресурсов ДВФУ [www.dvfu.ru](http://www.dvfu.ru)

## **VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения. Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя

электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав. Учебная аудитория для проведения лекционных занятий.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДВФУ)

---

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ  
РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

по дисциплине «Атомная электронная и колебательная спектроскопия»  
Направление подготовки – 03.03.02 Физика  
Экспериментальная физика  
Форма подготовки очная

Владивосток  
2019

Самостоятельная работа выполняется по заданию преподавателя в аудитории или вне аудитории. Обучающемуся необходимо: - выполнять все задания, выносимые преподавателем для самостоятельной работы; - активно работать с учебной литературой; - выносить на текущие консультации все неясные вопросы; - подготовку к экзамену проводить по экзаменационным теоретическим вопросам, предоставленным лектором; - при подготовке к экзамену все неясные моменты необходимо фиксировать и выносить на предэкзаменационную консультацию.

## МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ.

Студенту необходимо научиться четко конспектировать излагаемый на лекции материал – выделять темы разделов, подзаголовки, рисовать графики в хорошем масштабе, так как это позволит лучше подготовиться к экзамену. Изучение курса надо начинать с первой же недели занятий, так как из-за большого объема изучаемый материал преподается очень сжато. Материал, излагаемый в начале курса, постоянно используется в течение всего курса и последующего изучения специальных дисциплин.

Рекомендации по освоению дисциплины на лекционных занятиях:

- перед очередной лекцией необходимо просмотреть по конспекту и рекомендованной учебной литературе материал предыдущей лекции;
- бегло ознакомиться с содержанием очередной лекции по основным источникам литературы в соответствии с рабочей программой дисциплины;
- при затруднениях необходимо обратиться к лектору по графику его консультаций или на практических занятиях. Рекомендации по освоению дисциплины на практических занятиях:

- на занятия носить конспект лекций и рекомендованный сборник задач;
- до очередного практического занятия по конспекту и рекомендованной учебной литературе проработать теоретический материал, соответствующий теме занятия;

- в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения в понимании и освоении при решении задач, заданных для самостоятельного решения.

Для успешной сдачи экзамена студенты должны регулярно работать в соответствии с графиком организации аудиторной и самостоятельной работы:

а) отработать пропущенные по уважительной причине работы в течение семестра;

б) вовремя сдавать индивидуальные задания и отчеты по проделанным работам, помнить, что неотработанные темы лекций и практических занятий выносятся на экзамен.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДВФУ)

---

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

по дисциплине «Атомная электронная и колебательная спектроскопия»

**Направление подготовки – 03.03.02 Физика**

Экспериментальная физика

**Форма подготовки очная**

Владивосток

2019

## Паспорт ФОС

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ПК-1 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	Знает	природу атомных и молекулярных спектров; обладать теоретическими знаниями об энергетических состояниях атомов, молекул и переходах между ними;
	Умеет	анализировать атомные спектры элементов Периодической системы Д.И. Менделеева; определять строение и параметры простых молекул из спектроскопических данных.
	Владеет	практическими навыками в области атомной и молекулярной спектроскопии, методами решения расчетных задач, связанных с изучением строения молекул и их электронных, колебательных и вращательных спектров, интерпретацией экспериментальных данных в оптической атомной и молекулярной спектроскопии

№ п/п	Контролируемые модули/ разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций	Оценочные средства - наименование	
			текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Темы 1-4	ПК-1	устный опрос	защита реферата
			устный опрос	защита реферата
			устный опрос	контрольная работа
2	Темы 5-9	ПК-1	устный опрос	защита реферата
			устный опрос	защита реферата
			устный опрос	контрольная работа

### Шкала оценивания уровня сформированности компетенций

Код формулировка компетенции	и этапы формирования компетенции	критерии	показатели

ПК-1 способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	знает (пороговый уровень)	Как проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований	необходимую для проведения физических экспериментов информацию
	умеет (продвинутый)	Проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований	составлять описание проводимых исследований
	владеет (высокий)	Методами проведения физических экспериментов, составления отчетов и анализу результатов.	методами проведения исследований и анализом результатов

## Материал для проведения промежуточной аттестации

Сдача материала вы процессе текущего контроля и промежуточной аттестации осуществляется в виду устного опроса, написания реферата и контрольных работ по пятибалльной системе.

### Вопросы к промежуточной аттестации:

1. Классификация физ. методов по задачам и объектам.
2. Классификация методов исследований по физическим основам.
3. Взаимосвязь природы переходов в спектральных методах с диапазонами электромагнитного излучения.
4. Прямая и обратная задачи в физическом эксперименте.
5. Математическое моделирование при решении обратной задачи.
6. Примеры влияния симметрии при решении спектральных задач. Следствие инвариантности оператора энергии по отношению к преобразованиям симметрии.
7. Элементы и преобразования симметрии молекул.
8. Определение группы, некоторые свойства групп.
9. Преобразования симметрии  $H_2O$  как точечная группа симметрии, ее свойства.
10. Группа симметрии молекулы  $NH_3$ .
11. Преобразования координат, эквивалентные преобразования симметрии группы  $C_{2v}$ .



12. Преобразования координат, эквивалентные преобразованиям симметрии группы  $C_{3v}$ .
13. Представления групп, приводимые и неприводимые представления.
14. Основные свойства неприводимых представлений.
15. Классификация точечных групп симметрии, обозначения неприводимых представлений.
16. Интерпретация фотоэлектронных спектров  $H_2O$  и  $CH_4$  в терминах симметризованных молекулярных орбиталей.
17. Инфракрасный спектр поглощения молекул вида  $MX_4$  и симметрия колебаний.
18. Основы методов атомной спектроскопии.
19. Методы оптической электронной спектроскопии.
20. Рентгеновская эмиссионная спектроскопия молекул.
21. Фотоэлектронная спектроскопия валентных и основных электронных уровней.
22. Основные методы спектроскопии электронных состояний твердых тел.
23. Методы структурного анализа твердых тел.
24. Методы электронной спектроскопии поверхности твердых тел.
25. Дифракционные методы в исследовании поверхности.