

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**и.о. директора физтех-школы
физики и исследований им.
Ландау**

А.А. Воронов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Молекулярная спектроскопия
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра квантовой радиофизики
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: А.А. Нариц, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры квантовой радиофизики 25.05.2020

Аннотация

Дисциплина предназначена для студентов, прослушавших курсы квантовой механики, физической оптики и атомной спектроскопии. Программа курса включает следующие основные разделы: основные представления теории молекул, методы вычисления электронных термов и их расщеплений, структура колебательно-вращательных уровней энергии молекулы, неадиабатические переходы, излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах, комбинационное (рамановское) рассеяние, свободно-связанные и свободно-свободные радиационные переходы в двухатомной молекуле, основы нелинейной молекулярной спектроскопии, многоатомные молекулы. В результате овладения дисциплиной обучающийся получит базовые знания в области молекулярной спектроскопии, процессов, происходящих при взаимодействии света с системами, состоящими из двух и более атомов, ознакомится с современными теоретическими методами, предназначенных для расчета спектров молекул.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Цель курса состоит в обучении студентов старших курсов МФТИ базовым представлениям теории молекул, структуре спектров молекулярных соединений, а также основным теоретическим подходам, используемым при описании процессов взаимодействия света с молекулами. Успешное освоение материалов данного курса должно позволить выпускникам свободно ориентироваться в актуальных вопросах молекулярной спектроскопии.

Задачи дисциплины

- 1) Освоение основ молекулярной спектроскопии.
- 2) Переход от рассмотрения отдельных атомов к изучению процессов, происходящих при взаимодействии света с системами, состоящими из двух и более атомов.
- 3) Ознакомление студентов с современными теоретическими методами, используемыми при количественном описании спектров двух- и многоатомных молекул.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- Основные представления теории молекул;
- Структуру молекулярных спектров;
- Теоретические основы молекулярной спектроскопии;
- Современные методики определения спектральных свойств молекулярных систем.

уметь:

- Определять электронные термы и волновые функции двухатомных молекул;
- Расшифровывать экспериментально полученные спектры молекул;
- Вычислять относительные и абсолютные величины интенсивностей излучаемого и рассеиваемого излучения.

владеть:

- Математическим аппаратом молекулярной спектроскопии;
- Теоретическими основами современных методик молекулярной спектроскопии.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Основные представления теории молекул.	1	1		3
2	Методы вычисления электронных термов и их расщеплений.	1	1		3
3	Структура колебательно-вращательных уровней энергии молекулы.	1	1		3
4	Неадиабатические переходы.	2	2		4
5	Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах.	2	2		4
6	Комбинационное (рамановское) рассеяние.	2	2		4
7	Свободно-связанные и свободно-свободные радиационные переходы в двухатомной молекуле.	2	2		3

8	Основы нелинейной молекулярной спектроскопии.	2	2		3
9	Многоатомные молекулы.	2	2		3
Итого часов		15	15		30
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основные представления теории молекул.

Электронная, колебательная и вращательная энергия молекулы. Типы молекулярных фотопереходов. Линейчатый, полосатый и непрерывный спектры. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные волновые функции двухатомной молекулы. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей. Симметрия и классификация электронных термов гетероядерной и гомоядерной молекулы. Связь молекулярных термов с атомными.

2. Методы вычисления электронных термов и их расщеплений.

Асимптотические теории Ландау-Херринга (H_2^+) и Горькова-Питаевского (H_2). Теория Смирнова. Ab-initio подходы.

3. Структура колебательно-вращательных уровней энергии молекулы.

Приближение гармонического осциллятора и жесткого ротатора. Эффекты ангармонизма колебаний и взаимодействия колебаний с вращением, Λ -удвоение. Колебательно-вращательный квазиконтинуум. Модельные потенциалы. Влияние мультиплетности.

4. Неадиабатические переходы.

Области неадиабатичности. Пересечение и квазипересечение термов. Диабатический и адиабатический базисы. Преддиссоциация молекул. Теория Ландау-Зинера и ее обобщения. Применение теории Ландау-Зинера к описанию фотопроцессов с изменением электронного состояния молекулы.

5. Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах.

Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах. Правила отбора для электронных, колебательных и вращательных переходов. P-, Q-, R-ветви. Факторы Франка-Кондона в приближении Борна-Оппенгеймера. Вероятности, коэффициенты Эйнштейна, силы осцилляторов и сечения колебательно-вращательных и электронных переходов. Распределение интенсивностей в электронно-колебательно-вращательных спектрах.

6. Комбинационное (рамановское) рассеяние.

Структура колебательно-вращательного и вращательного спектра комбинационного рассеяния. Правила отбора.

7. Свободно-связанные и свободно-свободные радиационные переходы в двухатомной молекуле.

Свободно-связанные и свободно-свободные радиационные переходы в двухатомной молекуле. Структура спектров. Диффузные спектры. Преддиссоциация.

8. Основы нелинейной молекулярной спектроскопии.

Двухфотонные переходы. Субдоплеровская спектроскопия. Правила отбора для двухфотонных переходов. Упрощение формы спектров. Методы нелинейной молекулярной спектроскопии. Population labelling и Polarization labelling.

9. Многоатомные молекулы.

Теория многоатомной молекулы. Поверхности потенциальной энергии. Симметрия и классификация молекулярных термов. Типы колебаний и колебательные уровни энергии. Квантование вращения шарового, симметричного и асимметричного волчков.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, доска, медиапроектор, экран.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Теоретическая физика [Текст] : в 10 т. Т. 3 : Квантовая механика. Нерелятивистская теория : учеб. пособие для вузов / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского .— 5-е изд., стереотип. — М. : Физматлит, 2004, 2002 .— 808 с.
2. Квантовая электродинамика [Текст] : учеб. пособие для студентов физ. спец. ун-тов / В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский .— 4-е изд., испр. — М. : Физматлит, 1989, 2001, 2002, 2006 .— 720 с.
3. М.А.Ельяшевич, Атомная и молекулярная спектроскопия, Издание второе. Москва: Эдиториал УРСС, 2001.
4. Г.Герцберг, Спектры и строение двухатомных молекул, Москва: Издательство иностранной литературы, 1949.
5. Z. Wang and H. Xia, Molecular and laser spectroscopy, Springer-Verlag 1991.

Дополнительная литература

1. Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями [Текст], учеб. пособ. для вузов /Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов. -М., Наука, 1988
2. Физика атомов и молекул [Текст]/У. Фано, Л. Фано , -М., Наука, 1980
3. Н.Е. Кузьменко, Л.А. Кузнецова, Ю.Я. Кузяков, Проблемы описания интенсивностей электронных спектров двухатомных молекул в адиабатическом приближении, УФН 140, сс. 75-96 (1983).
4. S. V. Khristenko, A. I. Maslov, V. P. Shevelko, Molecules and Their Spectroscopic Properties, Springer-Verlag 1998

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине необходим ноутбук и медиапроектор. В отдельных случаях обучающиеся могут в рамках самостоятельной работы выполнять расчеты в системах Mathematics, Mathlab и т.п.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента в соответствии с данными в рабочей программе. Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на лекциях и практических занятиях;
- при необходимости подготовку к практическим занятиям, коллоквиумам, экзамену.

Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять знания на практике студенту необходимо решать как можно больше задач.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к лектору или преподавателю, ведущему практические занятия.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра квантовой радиофизики
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	А.А. Нариц, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Молекулярная спектроскопия» обучающийся должен:

знать:

- Основные представления теории молекул;
- Структуру молекулярных спектров;
- Теоретические основы молекулярной спектроскопии;
- Современные методики определения спектральных свойств молекулярных систем.

уметь:

- Определять электронные термы и волновые функции двухатомных молекул;
- Расшифровывать экспериментально полученные спектры молекул;
- Вычислять относительные и абсолютные величины интенсивностей излучаемого и рассеиваемого излучения.

владеть:

- Математическим аппаратом молекулярной спектроскопии;
- Теоретическими основами современных методик молекулярной спектроскопии.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Не предусмотрено.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов к экзамену:

1. Электронная, колебательная и вращательная энергия молекулы. Типы молекулярных фотопереходов. Линейчатый, полосатый и непрерывный спектры.
2. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные волновые функции двухатомной молекулы. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей.
3. Симметрия и классификация электронных термов гетероядерной и гомоядерной молекулы. Связь молекулярных термов с атомными.
4. Асимптотические теории Ландау-Херринга (H_2^+) и Горькова-Питаевского (H_2).
5. Теория Смирнова. Ab-initio подходы.
6. Приближение гармонического осциллятора и жесткого ротатора. Эффекты ангармонизма колебаний и взаимодействия колебаний с вращением, Λ -удвоение.
7. Колебательно-вращательный квазиконтинуум. Модельные потенциалы. Влияние мультиплетности.
8. Области неадиабатичности. Пересечение и квазипересечение термов.
9. Диабатический и адиабатический базисы. Преддиссоциация молекул.
10. Теория Ландау-Зинера и ее обобщения. Применение теории Ландау-Зинера к описанию фотопроцессов с изменением электронного состояния молекулы.
11. Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах. Правила отбора для электронных, колебательных и вращательных переходов. P-, Q-, R-ветви.
12. Факторы Франка-Кондона в приближении Борна-Оппенгеймера.
13. Вероятности, коэффициенты Эйнштейна, силы осцилляторов и сечения колебательно-вращательных и электронных переходов. Распределение интенсивностей в электронно-колебательно-вращательных спектрах.
14. Структура колебательно-вращательного и вращательного спектра комбинационного рассеяния. Правила отбора.
15. Свободно-связанные и свободно-свободные радиационные переходы в двухатомной молекуле. Структура спектров.
16. Диффузные спектры. Преддиссоциация.
17. Основы нелинейной молекулярной спектроскопии. Двухфотонные переходы.
18. Субдоплеровская спектроскопия. Правила отбора для двухфотонных переходов.
19. Упрощение формы спектров. Методы нелинейной молекулярной спектроскопии. Population labelling и Polarization labelling.
20. Теория многоатомной молекулы. Поверхности потенциальной энергии. Симметрия и классификация молекулярных термов.
21. Типы колебаний и колебательные уровни энергии. Квантование вращения шарового, симметричного и асимметричного волчков.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Электронная, колебательная и вращательная энергия молекулы. Типы молекулярных фотопереходов. Линейчатый, полосатый и непрерывный спектры.
2. Излучение и поглощение света на связанно-связанных переходах. Правила отбора для электронных, колебательных и вращательных переходов. P-, Q-, R-ветви.

Билет 2.

1. Адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные волновые функции двухатомной молекулы. Методы валентных связей и молекулярных орбиталей.
2. Факторы Франка-Кондона в приближении Борна-Оппенгеймера.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен проводится по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.