

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

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Основы атомной и молекулярной спектроскопии**

**Уровень высшего образования:**  
Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Лазерная химия

**Форма обучения:**  
очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения поддисциплине (модулю)
<b>СПК-2.С.</b> Способен применять знание основных теоретических принципов методов лазерной спектроскопии и диагностики в практической деятельности	<b>СПК-2.С.1</b> грамотно использует методы лазерной спектроскопии и диагностики при изучении химических объектов	<b>Знать:</b> физические и математические модели, используемые в атомной и молекулярной спектроскопии, их возможности и ограничения <b>Уметь:</b> интерпретировать спектроскопические данные о физико-химических процессах, полученных методами лазерной спектроскопии
<b>СПК-5.С.</b> Способен проводить квантовохимические и термодинамические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	<b>СПК-5.С.2</b> Проводит расчеты с использованием современных программных продуктов и баз данных	<b>Уметь:</b> использовать программные продукты для выполнения квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул <b>Владеть:</b> навыками квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул с использованием существующих программные продукты и баз спектральных данных <b>Владеть:</b> навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для расчет термодинамических функций атомов и молекул

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

*Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 86 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (72 часа – занятия лекционного типа, 4 часа – индивидуальные консультации, 10 часов – промежуточный контроль успеваемости), 58 часов составляет самостоятельная работа студента.*

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

Обучающийся должен освоить дисциплины: «Основы квантовой механики», «Квантовая химия» и «Строение молекул».

**Знать:** современные способы аналитического описания структурных характеристик и энергетических свойств молекулярных систем, возможности описания колебательных и вращательных состояний молекул на примере модельных систем (гармонический осциллятор, жесткий ротатор и др.), ограничения используемых современных моделей строения молекул; основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры и строения молекул.

**Уметь:** решать простейшие квантово-механические задачи.

**Владеть:** навыками поиска недостающей информации и ее анализа, существующими стандартными методами расчетными методами, используемыми при решении квантово-механических задач.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема №1. Общие вопросы спектроскопии	5	4					4	1		1
Тема №2. Уровни энергии и спектры атома водорода и водородоподобных ионов. Тонкая и сверхтонкая структура.	11	4			2	2	8	2	1	3
Тема №3. Многоэлектронные атомы	5	4					4	1		1

и ионы. Оболочка, конфигурация, терм, полиада. Типы связи.										
Тема №4. Эквивалентные и неэквивалентные электроны. Смешанные конфигурации.	5	4					4	1		1
Тема №5. Уровни энергии и спектры атомов с одним внешним <i>s</i> -электроном.	5	4					4	1		1
Тема №6. Уровни энергии и спектры атомов с двумя внешними <i>s</i> -электронами.	5	4					4	1		1
Тема №7. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися <i>p</i> -оболочками.	5	4					4	1		1
Тема №8. Уровни энергии и спектры атомов инертных газов.	5	4					4	1		1
Тема №9. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися <i>d</i> -оболочками.	5	4					4	1		1
Тема №10. Уровни энергии и спектры атомов с достраивающимися <i>f</i> -оболочками.	11	4			2	2	8	2	1	3
Тема №11. Электронные состояния двухатомной молекулы. Кривая потенциальной энергии.	5	4					4	1		1
Тема №12. Молекулярные электрон-	5	4					4	1		1

ные оболочки. Электронные конфигурации, термы										
Тема №13. Взаимодействие электронного движения с вращением молекулы. Типы связи.	6	4					4	2		2
Тема №14. Правила отбора для переходов в дипольном приближении	5	4					4	1		1
Тема №15. Уровни энергии и спектры молекул $H_2^+$ , $H_2$ и $H_2^-$ .	5	4					4	1		1
Тема №16. Уровни энергии и спектры гомоядерных двухатомных молекул.	5	4					4	1		1
Тема №17. Уровни энергии и спектры гетероядерных двухатомных молекул.	5	4					4	1		1
Тема №18. Особенности строения трехатомных молекул, их электронные состояния и симметрия.	12	4			2	2	8	2	2	4
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36					4	4	32		32
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>72</b>			<b>4</b>	<b>10</b>	<b>86</b>	<b>54</b>	<b>4</b>	<b>58</b>

#### 6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных

школ МГУ.

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

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

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

#### Основная литература

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

#### Дополнительная литература

1. J. Rubio, J. J. Perez. Energy Levels in the jj-coupling Scheme // Journal of Chemical Education, 1986, V.63, No.6, P.476-478.
  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.
- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

#### 9. Язык преподавания – русский

#### 10. Преподаватели:

- 10.1. К.х.н, доц., Попов Андрей Михайлович, кафедра лазерной химии химического факультета МГУ

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

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

### **Контрольные вопросы к коллоквиуму**

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  $\text{N}_2^+$   $\text{N}_2$   $\text{N}_2^-$ .
13. Уровни энергии и спектры гомоядерных двухатомных молекул.
14. Уровни энергии и спектры гетероядерных двухатомных молекул.

### **Перечень вопросов к экзамену:**

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  $\text{N}_2$ : 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. Эксимерные лазеры на молекулах  $\text{NeF}$ ,  $\text{ArF}$ ,  $\text{KrF}$ ,  $\text{XeF}$  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  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2^-$ .
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

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

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 неприципиального 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

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: физические и математические модели, используемые в атомной и молекулярной спектроскопии, их возможности и ограничения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене
Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: интерпретировать спектроскопические данные о физико-химических процессах, полу-	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене

<p>ченными методами лазерной спектроскопии</p> <p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул</p>	
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: навыками квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул с использованием существующих программные продукты и баз спектральных данных</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для расчета термодинамических функций атомов и молекул</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене</p>