

**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 нанооптики и спектроскопии
курс:	1
квалификация:	магистр

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

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: Л.А. Сурин, д-р физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры нанооптики и спектроскопии 04.06.2020

Аннотация

Молекулярная спектроскопия это наука об исследовании энергетических переходов между электронными, колебательными и вращательными уровнями энергии молекул с помощью света. Спектры молекул дают уникальную информацию о строении и свойствах веществ, которую можно использовать для точного определения состава атмосферы планет и межзвездной среды, для анализа причин глобального потепления и оценки толщины озонового слоя Земли, детектирования примесей в чистых газах и жидкостях, обнаружения отравляющих и взрывоопасных веществ, для изучения биологической активности молекул и т.д. Курс рассматривает физические явления, приводящие к возникновению спектров поглощения, испускания или рассеяния, структуру этих спектров, обусловленную вращениями, колебаниями и изменениями электронного состояния молекул, а также вопросы постановки эксперимента, устройства различных типов спектрометров, методы обработки данных.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью дисциплины «Молекулярная спектроскопия» является формирование у студентов профессиональных компетенций, связанных с использованием современных теоретических концепций в области физики молекул и молекулярной спектроскопии; развитие умений, основанных на полученных теоретических знаниях, позволяющих анализировать и интерпретировать молекулярные спектры, определять равновесную структуру молекул, понимать внутримолекулярную динамику и межмолекулярные взаимодействия; получение студентами навыков самостоятельной исследовательской работы, предполагающей изучение специфических алгоритмов, инструментов и компьютерных программ, необходимых для решения задач молекулярной спектроскопии; получение практических навыков использования современных баз данных по молекулярным спектрам для решения задач физики атмосферы и астрофизики.

Задачи дисциплины

Задачами учебной дисциплины являются: освоение студентами знаний по спектрам молекул, свойствам симметрии молекул, методам молекулярной спектроскопии; формирование у них исследовательских навыков и способности применять полученные знания на практике.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
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-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

общие положения о химической связи и структуре молекул; основные характеристики уровней энергии, интенсивности переходов, ширина и форма спектральных линий; правила отбора; типы молекулярных спектров и экспериментальные методы их регистрации; современные методы расчета и обработки молекулярных спектров.

уметь:

применять полученные знания для интерпретации спектров молекул различной природы; применять современные компьютерные программы для анализа спектров молекул; извлекать из молекулярных спектров информацию о структуре и динамике молекул.

владеть:

навыками работы с современной научной литературой по актуальным вопросам молекулярной спектроскопии; методами теоретического моделирования спектров молекул и их анализа с целью определения молекулярных констант и параметров межмолекулярного взаимодействия; навыками использования современных баз данных по молекулярным спектрам для решения задач физики атмосферы и астрофизики.

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	Введение в физику молекул и молекулярную спектроскопию	3			3
2	Экспериментальные методы молекулярной спектроскопии	4			4
3	Межмолекулярные взаимодействия	4			4
4	Вращательные спектры молекул	4			4
5	Колебательные и колебательно-вращательные спектры молекул	4			4
6	Электронные спектры молекул	4			4
7	Сложные молекулы и кластеры	4			4
8	Молекулы в межзвездной среде	3			3
Итого часов		30			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. Введение в физику молекул и молекулярную спектроскопию

Взаимодействие излучения с веществом. Уровни энергий. Молекулярный спектр. Интенсивности, ширины и форма линий. Применение молекулярной спектроскопии в различных науках. Идентификация соединений – установление строения. Определение энергетических и геометрических характеристик молекул.

2. Экспериментальные методы молекулярной спектроскопии

Современные спектральные методы. Электронная спектроскопия. Инфракрасная спектроскопия. Спектроскопия комбинационного рассеяния света. Микроволновая спектроскопия. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Масс-спектрометрия. Эффекты Штарка и Зеемана в экспериментальных методах.

3. Межмолекулярные взаимодействия

Внутримолекулярное и межмолекулярное взаимодействия. Разновидности межмолекулярных взаимодействий. Силы Ван-дер-Ваальса. Ориентационное, индукционное, дисперсионное взаимодействия. Водородная связь.

4. Вращательные спектры молекул

Двухатомные молекулы. Моменты инерции; вращательная постоянная; влияние центробежного растяжения. Тонкая структура.

Линейные молекулы. Вращательные состояния, симметрия и спиновая статистика. Сверхтонкая ядерная структура.

Молекулы типа симметричного волчка. Вращательные состояния, симметрия и спиновая статистика. Чередование интенсивностей. Инверсионное удвоение и инверсионный спектр NH₃.

Молекулы типа асимметричного волчка. Вращательные состояния, симметрия и спиновая статистика. Правила отбора. Интенсивности переходов.

5. Колебательные и колебательно-вращательные спектры молекул

Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул; колебательно-вращательные взаимодействия; распределение интенсивностей в колебательно-вращательном спектре поглощения; влияние спиновой статистики ядер; роль симметрии электронной волновой функции.

Линейные молекулы. Вращательные состояния, симметрия и спиновая статистика. Кориолисово взаимодействие. l-удвоение.

Молекулы типа симметричного волчка. Кориолисово взаимодействие компонент вырожденных колебаний и разных колебаний. Симметрия и спиновая статистика. Параллельные и перпендикулярные полосы.

Молекулы типа асимметричного волчка.

Молекулы типа сферического волчка.

6. Электронные спектры молекул

Электронные спектры двухатомных молекул. Электронно-колебательные спектры. Принцип Франка-Кондона. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Вращательные постоянные в верхних и нижних состояниях. Схема Гунда. Электронные спектры многоатомных молекул.

7. Сложные молекулы и кластеры

Формирование кластеров в газовой фазе. Строение и свойства кластеров. Молекулы в матрицах. Молекулы в гелиевых каплях. Радикалы и молекулярные ионы. Биомолекулы.

8. Молекулы в межзвездной среде

Состав межзвездной среды. Содержание водорода и гелия. Молекулы в межзвездных облаках. Физические условия в межзвездных облаках. Космическая пыль. Радиоастрономия.

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

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиа-проектором и экраном.

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Спектры и строение двухатомных молекул [Текст]/Г. Герцберг , -М., Изд-во иностранной лит., 1949
2. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул [Текст]/Г. Герцберг , -М., Изд-во иностранной лит., 1949
3. Электронные спектры и строение многоатомных молекул [Текст]/Г. Герцберг , -М., Мир, 1969

Дополнительная литература

1. Атомная и молекулярная спектроскопия [Текст]/М. А. Ельяшевич, -М., Физматгиз, 1962
2. Колебания молекул [Текст]/М. В. Волькенштейн [и др.], -М., Наука, 1972
3. Радиоспектроскопия [Текст] = Microwave spectroscopy, монография/Ч. Таунс, А. Шавлов, -М., Изд-во иностр. лит., 1959
4. Bernath Peter F. 2005. "Spectra of Atoms and Molecules", Oxford University Press; 2 edition.
5. Gordy W., Cook R.L. 1984. Microwave molecular spectra. John Wiley & Sons Inc.

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

<https://cdms.astro.uni-koeln.de/>

The Cologne Database for Molecular Spectroscopy (CDMS)

<https://hitran.org/>

HITRAN is an acronym for high-resolution transmission molecular absorption database. HITRAN is a compilation of spectroscopic parameters that a variety of computer codes use to predict and simulate the transmission and emission of light in the atmosphere.

<http://pgopher.chm.bris.ac.uk/index.html>

PGOPHER is a general purpose program for simulating and fitting rotational, vibrational and electronic spectra. It represents a distillation of several programs written and used over the past decade or so within the Bristol laser group and elsewhere, but is a re-write from scratch to produce a general purpose and flexible program. PGOPHER will handle linear molecules and symmetric and asymmetric tops, including effects due to unpaired electrons and nuclear spin, with a separate mode for vibrational structure. The program can handle many sorts of transitions, including Raman, multiphoton and forbidden transitions. It can simulate multiple species and states simultaneously, including special effects such as perturbations and state dependent predissociation. Fitting can be to line positions, intensities or band contours.

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

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

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 и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

– посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;

- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

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 нанооптики и спектроскопии
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр

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

Разработчик: Л.А. Сурин, д-р физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
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-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Молекулярная спектроскопия» обучающийся должен:

знать:

общие положения о химической связи и структуре молекул; основные характеристики уровней энергии, интенсивности переходов, ширина и форма спектральных линий; правила отбора; типы молекулярных спектров и экспериментальные методы их регистрации; современные методы расчета и обработки молекулярных спектров.

уметь:

применять полученные знания для интерпретации спектров молекул различной природы; применять современные компьютерные программы для анализа спектров молекул; извлекать из молекулярных спектров информацию о структуре и динамике молекул.

владеть:

навыками работы с современной научной литературой по актуальным вопросам молекулярной спектроскопии; методами теоретического моделирования спектров молекул и их анализа с целью определения молекулярных констант и параметров межмолекулярного взаимодействия; навыками использования современных баз данных по молекулярным спектрам для решения задач физики атмосферы и астрофизики.

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

Используются контрольные вопросы на лекциях и задания для домашней работы.

Типовые вопросы:

Виды движения в молекуле и типы молекулярных спектров.

Вероятности переходов между уровнями энергии и правила отбора для двухатомных молекул.

Влияние свойств симметрии и спиновой статистики ядер на вращательные уровни энергии линейных молекул.

Инверсионный спектр аммиака (NH₃).

Понятие о нормальных колебаниях молекул, классификация нормальных колебаний по форме и симметрии.

Сравнительные характеристики спектров комбинационного рассеяния и инфракрасного поглощения.

Случаи связи Гунда.

Распространенность молекул в межзвездной среде.

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

Перечень контрольных вопросов:

1. Инверсионное удвоение в молекулярных спектрах и спектр молекулы аммиака (NH_3).
2. Колебательная структура электронных переходов в двухатомных молекулах. Принцип Франка-Кондона.
3. Частота колебаний молекулы H_2 – $\epsilon = 4401.21 \text{ см}^{-1}$, постоянная ангармонизма $x_{ee} = 121.33 \text{ см}^{-1}$. Оценить энергию диссоциации D_0 молекулы водорода.
4. Вращательный спектр молекул типа симметричного волчка. Правила отбора. Интенсивности линий.
5. Понятие о группе. Точечные группы симметрии. Правила отнесения молекул к точечным группам симметрии.

Примеры билетов:

Билет 1.

1. Вращательный спектр молекул типа симметричного волчка. Правила отбора. Интенсивности линий.
2. Колебательная структура электронных переходов в двухатомных молекулах. Принцип Франка-Кондона.

Билет 2.

1. Инверсионное удвоение в молекулярных спектрах и спектр молекулы аммиака (NH_3).
2. Частота колебаний молекулы H_2 – $\epsilon = 4401.21 \text{ см}^{-1}$, постоянная ангармонизма $x_{ee} = 121.33 \text{ см}^{-1}$. Оценить энергию диссоциации D_0 молекулы водорода.

Билет 3.

1. Понятие о группе. Точечные группы симметрии. Правила отнесения молекул к точечным группам симметрии.
2. Классификация электронных состояний двухатомных молекул. Случаи связи Гунда.

Билет 4.

1. Понятие о нормальных колебаниях молекул, классификация нормальных колебаний по форме и симметрии.
2. Уширения молекулярных спектральных линий.

Билет 5.

1. Потенциал Морзе для двухатомной молекулы.
2. Эффекты Штарка и Зеемана в молекулярных спектрах.

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 в устной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 1 час на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.