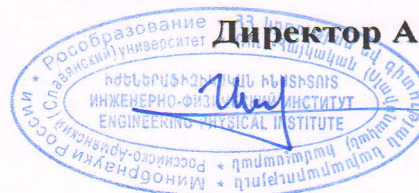


**ГОУ ВПО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ
(СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ**

Составлен в соответствии с государственными требованиями к минимуму содержания и уровню подготовки выпускников по направлению 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника и Положением «Об УМКД РАУ».

УТВЕРЖДАЮ:



Директор А.А.Саркисян

21.07. 2023г.

Инженерно-Физический Институт

Кафедра: Квантовая и оптическая электроника

Автор: д-р физ.-мат.наук Папоян Арам Вардгесович

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

Дисциплина: Б1.В.05 «Спектроскопия»

Направление: 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника

**Основная образовательная программа магистратуры:
«Квантовая и оптическая электроника»**

ЕРЕВАН 2023

1. Аннотация

Содержание дисциплины охватывает спектроскопию атомов, молекул и конденсированных сред. Рассматриваются физические основы важнейших типов взаимодействий определяющих уровни энергии и переходы между ними, основы теории оптических спектров атомов, молекул и твердых тел, влияние внешних полей на структуру спектров и возможность применения этих знаний в практических исследованиях.

Цель преподавания дисциплины:

Целью курса является получение фундаментальных знаний в области спектроскопии, а также формирование у студентов навыков регистрации и обработки спектров. Кроме того, при освоении дисциплины студенты знакомятся с вопросами технического оснащения спектроскопии. Полученные знания позволят выпускнику успешно работать в избранной сфере деятельности, быть востребованным на рынке труда и обеспечивающих самостоятельное приобретение новых знаний, необходимых для адаптации и успешной деятельности в выбранной профессии.

Учебная задача:

Задачи курса состоят в изложении современных основ спектроскопии атомов, молекул и конденсированных сред. В результате изучения дисциплины студент должен приобрести знания, умения и навыки, необходимые для его профессиональной деятельности.

Основные методы проведения занятий, лекции, семинары, самостоятельная работа.

Список литературы: содержит 5 наименований книг, что поможет студентам освоить и создать свой профессиональный исследовательский инструментарий, обеспечить целостность обучения.

Краткое содержание курса: Предмет кристаллофизика. Понятие симметрии. Симметрия метод кристаллофизики. Элементы симметрии. Симметрические преобразования. Точечные группы симметрии пространственных фигур. Предельные группы симметрии пространственных фигур. Группы симметрии кристаллов. Кристаллографическая номенклатура. Установка кристаллов. Простые плотноупакованные структуры. Определение размеров эл. ячейки, положения ядер и распределение электронов внутри ячейки с помощью дифракции волн в кристалле. Обратное пространство. Обратная решетка. Условие дифракции. Зоны Бриллюэна. Векторы и скаляры.

Полярный тензор 2-го ранга. Симметрия полярного тензора 2-го ранга. Аксиальный тензор 2-го ранга и его симметрия. Тензоры высших рангов. Симметрия физических явлений. Принцип Неймана. Принцип Кюри. Электрические свойства кристаллов. Оптические свойства кристаллов. Магнитные свойства кристаллов. Механические свойства кристаллов. Пьезоэлектрические свойства. Термодинамика кристаллов.

2. Требования к исходным уровням знаний и умений студентов

Знать: начала квантовой механики, атомной физики и физики твердого тела.

Уметь: находить решения дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами.

Владеть: методами линейной алгебры и теории функций комплексной переменной.

3. Цель и задачи дисциплины

Основная цель изучаемой дисциплины — ознакомить студентов с основами теории оптических спектров атомов, молекул и твердых тел и современными экспериментальными методами спектроскопии. Обучить возможности применения этих знаний в практических исследованиях, привить студентам навыки теоретического анализа при решении практических задач.

4. Требования к уровню освоения содержания дисциплины

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: основные типы спектров; классификацию атомных и молекулярных энергетических уровней; влияние внешних полей на структуру спектров; иметь представление об оптических свойствах кристаллов.

Уметь: вычислять энергии уровней простейших атомов и молекул;

Владеть: навыками теоретического анализа при решении практических задач.

5. Трудоемкости дисциплины и видов учебной работы по учебному плану

Виды учебной работы	Всего (ак. час)
<i>Общая трудоемкость изучения дисциплины, в т.ч.:</i>	144(4кр)
1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	34
1.1. Лекционные занятия	18
1.2. Семинарские занятия	-
1.3. Практические занятия	16
1.4. Лабораторные работы	-
2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	72
2.1. Контактная самостоятельная работа	-
2.2. Бесконтактная самостоятельная работа	72
<i>Итоговый контроль</i>	<i>Экзамен 36</i>

6. Распределение весов по формам контроля

Веса и формы контролей	Вес форм текущих контролей в результирующей оценке текущего контроля			Вес форм промежуточных контролей и результирующей оценки текущего контроля в итоговой оценке промежуточного контроля			Вес итоговых оценок промежуточных контролей в результирующей оценке промежуточного контроля	Вес результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля
	M1	M2	M3	M1	M2	M3		
Вид учебной работы/ контроля								
Контрольная работа				0	0	1		
Тест								
Курсовая работа								
Лабораторные работы								
Письменные домашние задания	0	0	0,5					
Эссе								
Семинар	0	0	0,5					
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках соответствующих промежуточных контролей				0	0	0		
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0	
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0,5	
Вес итоговой оценки 3-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0,5	
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля								0,5
Вес оценки экзамена/зачета в результирующей оценке итогового контроля								0,5
	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$

7. Содержание дисциплины

7.1 Тематический план и трудоемкости аудиторных занятий

Разделы и темы дисциплины	Всего (ак. часов)	Лекционные занятия (ак. часов)	Семинарские занятия (ак. часов)	Практические занятия (ак. часов)	Лабораторные работы (ак. часов)
1	2	3	4	5	6
МОДУЛЬ 1. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ СПЕКТРОСКОПИИ					
Раздел 1. Спектроскопия и некоторые важные результаты квантовой механики	5	2	-	3	-
<i>Тема 1.1 Уравнение Шредингера и некоторые его решения.</i>	3	1	-	2	-
<i>Тема 1.2 Угловой момент электрона и ядра.</i>	2	1	-	1	-
Раздел 2. Взаимодействие электромагнитного излучения с атомами и молекулами	6	2	-	4	-
<i>Тема 2.1 Поглощение и испускание излучения. Силы осцилляторов.</i>	3	1	-	2	-
<i>Тема 2.2 Ширина линии и механизмы вызывающие ее уширение.</i>	3	1	-	2	-
Раздел 3. Общая особенность экспериментальных методов	5	2	-	3	-
<i>Тема 3.1 Основные составляющие эксперимента.</i>	3	1	-	2	-
<i>Тема 3.2 Преобразование Фурье и интерферометры.</i>	2	1	-	1	-
Раздел 4. Молекулярная симметрия	3	1	-	2	-
<i>Тема 4.1 Элементы симметрии. Точечные группы. Симметрия и дипольные моменты.</i>	3	1	-	2	-
Раздел 5. Колебательная спектроскопия	6	2	-	4	-
<i>Тема 5.1 Двухатомные молекулы: инфракрасные и романовские спектры.</i>	3	1	-	2	-
<i>Тема 5.2 Вращательно-колебательная спектроскопия.</i>	2	1	-	1	-
МОДУЛЬ 2. АТОМНАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ					
Раздел 6. Атомная спектроскопия	6	2	-	4	-
<i>Тема 6.1 Электронные оболочки атомов. Периодическая таблица</i>	3	1	-	2	-

<i>Тема 6.2 Квантование момента. Векторное представление момента.</i>	3	1	-	2	-
Раздел 7. Спектроскопия двухатомных молекул	11	5	-	6	-
<i>Тема 7.1 Молекулярные орбитали. Классификация электронных состояний.</i>	2	1	-	1	-
<i>Тема 7.2 Колебательная структура. Франка-Кондона принцип.</i>	3	1	-	2	-
<i>Тема 7.3 Вращательная тонкая структура.</i>	2	1	-	1	-
<i>Тема 7.4 Диффузные спектры.</i>	4	2	-	2	-
Раздел 8. Атомы и молекулы в конденсированных средах	4	2	-	2	-
<i>Тема 8.1 Теория кристаллического поля и поля лигандов.</i>	2	1	-	1	-
<i>Тема 8.2 Примесные атомы с конфигурацией s^2 и f^n в кристаллах</i>	2	1	-	1	-
ИТОГО	46	18	-	28	-

7.2 Содержание разделов и тем дисциплины

МОДУЛЬ 1.

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ СПЕКТРОСКОПИИ.

Раздел 1. Спектроскопия и некоторые важные результаты квантовой механики

Тема 1.1 Уравнение Шредингера и некоторые его решения. Атом водорода.

Спектроскопия и квантовая механика. Основы теории Бора. Некоторые решения уравнения Шредингера. Атом водорода. Изотопический сдвиг. Тонкая структура водородного спектра. ([1-5])

Тема 1.2 Угловой момент электрона и ядра.

Угловой момент электрона и ядра. Жесткий ротатор. Гармонический осцилятор. ([1-3])

Раздел 2. Взаимодействие электромагнитного излучения с атомами и молекулами

Тема 2.1 Поглощение и испускание излучения.

Поглощение и испускание излучения. Силы осцилляторов. ([2-5])

Тема 2.2 Ширина линии и механизмы, вызывающие ее уширение.

Естественная ширина линии. Доплеровское уширение. Уширение от давления. ([2-5])

Раздел 3. Общая особенность экспериментальных методов

Тема 3.1 Основные составляющие эксперимента.

Спектрометр. Дисперсионные элементы. Призмы, дифракционные решетки. ([2])

Тема 3.2 Преобразование Фурье и интерферометры.

Радиочастотное излучение, инфракрасное излучение, видимая и ультрафиолетовая области. ([2], [5])

Раздел 4. Молекулярная симметрия

Тема 4.1 Молекулярная симметрия.

Элементы симметрии. Точечные группы. Симметрия и дипольные моменты. ([2])

Раздел 5. Колебательная спектроскопия

Тема 5.1 Двухатомные молекулы: инфракрасные и романовские спектры.

Двухатомные молекулы: инфракрасные и романовские спектры. Стокс и анти-Стокс романовское рассеяние. ([2], [3], [5], [7])

Тема 5.2 Вращательно-колебательная спектроскопия.

Вращательно-колебательная спектроскопия. Инфракрасные и романовские спектры. ([2], [3], [5], [7]).

МОДУЛЬ 2.

АТОМНАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Раздел 6. Симметрия пространственных фигур

Тема 6.1 Электронные оболочки атомов. Периодическая таблица.

Квантовые числа электронов в сложном атоме и принцип Паули. Электронные слои и оболочки и их заполнение. Правило Хунда. ([2-4]).

Тема 6.2 Квантование момента. Векторное представление момента.

Векторное представление. Связывание угловых моментов. Эквивалентные электроны. ([1], [2-4])

Раздел 7. Спектроскопия двухатомных молекул

Тема 7.1 Молекулярные орбитали. Классификация электронных состояний.

Двухатомные молекулы с одинаковыми ядрами. Двухатомные молекулы с разными ядрами. Классификация электронных состояний. Электронные и колебательные правила отбора. ([2], [3], [5], [7])

Тема 7.2 Колебательная структура. Франка-Кондона принцип.

Кривые потенциальной энергии возбужденных электронных состояний. Франка-Кондона принцип. ([2-4])

Тема 7.3 Вращательная тонкая структура.

Вращательная тонкая структура. ([2-4])

Тема 7.4 Диффузные спектры

Многоатомные молекулы. Диффузные спектры. ([2])

Раздел 8. Атомы и молекулы в конденсированных средах.

Тема 8.1 Теория кристаллического поля и поля лигандов.

Теория кристаллического поля и поля лигандов. ([6], [7])

Тема 8.2 Примесные атомы с конфигурацией s^2 и f^n в кристаллах.

Примесные атомы с конфигурацией s^2 в кристаллах. Примесные атомы с конфигурацией f^n в кристаллах. ([6], [7])

7.3 Вопросы

- 1. Спектроскопия и квантовая механика. Основы теории Бора. Некоторые решения уравнения Шредингера.*
- 2. Атом водорода. Изотопический сдвиг. Тонкая структура водородного спектра.*
- 3. Угловой момент электрона и ядра. Жесткий ротатор. Эффект Зеемана.*
- 4. Нормальный и аномальный эффекты. Переход к сильному полю. Эффект Паашена-Бака.*
- 5. Правила отбора для электро-дипольного, магнитно-дипольного и электро-квадрупольного излучения*
- 6. Поглощение и испускание излучения. Силы осцилляторов.*
- 7. Ширина линии и механизмы, вызывающие ее уширение.*
- 8. Основные составляющие спектроскопического эксперимента.*
- 9. Преобразование Фурье и интерферометры.*
- 10. Элементы молекулярной симметрии. Точечные группы.*
- 11. Симметрия и дипольные моменты.*
- 12. Двухатомные молекулы:инфракрасные спектры.*
- 13. Двухатомные молекулы: романовские спектры.*
- 14. Вращательно-колебательная спектроскопия.*
- 15. Квантовые числа электронов в сложном атоме.*
- 16. Электронные слои и оболочки и их заполнение. Правило Хунда.*
- 17. Квантование момента. Векторное представление момента.*
- 18. Молекулярные орбитали. Классификация электронных состояний.*
- 19. Колебательная структура. Франка-Кондона принцип.*
- 20. Вращательная тонкая структура.*
- 21. Многоатомные молекулы. Диффузные спектры.*
- 22. Спектроскопия твердого тела.*

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Microsoft Power Point. Лекции.

8.1. Рекомендуемая литература

а) Основная литература

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [2] J.M. Hollas. Modern Spectroscopy. J. Wiley Ltd. 2004.
- [3] М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М:Эдиториал УРСС, Москва. 2001.
- [4] С.Э. Фриш. Оптические спектры атомов. М: ФМ. 1963.
- [5] К. Бенуэл. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир. 1985.
- [6] В. К. Милославский, Л. А. Агеев, Спектроскопия твердого тела. Харьков, 1988.
- [7] Е.А. Раджабов. Спектроскопия атомов и молекул в конденсированных средах. ИГХ СО РАН, 2013.

8.2. Программные средства освоения дисциплины

Mathematica 5.1, Origin.

8.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютер, проектор