

Министерство образования и науки Российской Федерации

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра ФИЗИКИ

Рабочая программа по дисциплине

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ СПЕКТРОСКОПИИ

Основная профессиональная образовательная программа
высшего образования программы бакалавриата по направлению подготовки

03.03.02 «Физика»

Направленность (профиль):

Физика

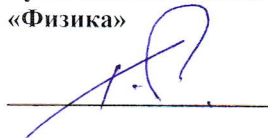
Квалификация:

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Согласовано
Руководитель ОПОП
«Физика»



Бобровский А.П.

Утверждаю

Председатель УМС  И.И. Палкин

Рекомендована решением

Учебно-методического совета

19 июля 2018 г., протокол № 4

Рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

15 марта 2018 г., протокол № 8

Зав. кафедрой  Бобровский А.П.

Авторы-разработчики:

 Потимова И.А.

 Логинов А.В.

Программа дисциплины «Численные методы спектроскопии». Для высших учебных заведений. – СПб.: Изд. РГГМУ, 2018 – 17 с.

Составитель: Логинов А. В., доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры физики РГГМУ.

Ответственный редактор: Бобровский А.П. заведующий кафедрой физики РГГМУ.

Рецензент: Тупицын И.И., доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры квантовой механики СПбГУ

© Логинов А.В., 2018 г.

© Российский государственный гидрометеорологический университет (РГГМУ), 2018.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью дисциплины «Численные методы спектроскопии» является подготовка студентов, владеющих углубленными теоретическими знаниями о явлениях, протекающих в атомах и ионах, необходимых для освоения курсов профессиональных дисциплин, и всей последующей деятельности после университета.

Основная задача дисциплины «Численные методы спектроскопии» - ознакомление с теоретическими подходами к описанию спектров атомов и ионов, моделями и способами вычисления основных спектроскопических характеристик, анализом полученных данных.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина "Численные методы спектроскопии" (Б1.В.ОД.17) для направления 03.03.02 – «Физика» относится к вариативным обязательным дисциплинам цикла Б1 и изучается в восьмом семестре, поэтому при изучении данной дисциплины обучающиеся должны освоить разделы дисциплин «Математика» «Общая физика», «Химия», «Физическая химия», «Квантовая теория».

Дисциплина «Численные методы спектроскопии» изучается параллельно с дисциплиной «Теория переноса электромагнитных волн в газах» и используется при написании выпускной квалификационной работы бакалавра.

ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение обучающихся с ограниченными возможностями здоровья при необходимости осуществляется на основе адаптированной рабочей программы с использованием специальных методов обучения и дидактических материалов, составленных с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся (обучающегося).

При определении формы проведения занятий с обучающимся-инвалидом учитываются рекомендации, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений жизнедеятельности.

3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОСНОВНОЙ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Численные методы спектроскопии» формирует компетенции ОПК-1, ОПК-3, ПК-1, ПК-2.

ОПК-1: способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о Земле и человеке)	
Уровень освоения	Признаки проявления
Продвинутый	
Знает:	Цели и задачи исследования состояния окружающей среды, которые могут быть достигнуты с помощью спектроскопических методов
Умеет:	Использовать спектроскопические данные для анализа состояния окружающей среды
Владеет:	Навыками работы с научной отечественной и зарубежной информацией о спектроскопических исследованиях
ОПК-3:Способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач	
Уровень освоения	Признаки проявления
Продвинутый	
Знает:	Основы атомной физики и квантово-механические модели атомов и ионов
Умеет:	Составить уравнение Шредингера для простейших атомных систем и иметь представление о способе его решения
Владеет:	Навыками трактовки полученных спектроскопических данных для этих систем
ПК-1: способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	
Уровень освоения	Признаки проявления
Минимальный	
Знает:	Основные представления о спектре атома, единицы измерения атомных величин
Умеет:	Сформулировать задачу спектрального исследования
Владеет:	Навыками использования специальной научной литературы по спектроскопии
Базовый	
Знает:	Основные внутриатомные взаимодействия и соответствующие им операторы
Умеет:	Пользоваться специальными величинами, принятыми для описания атомных спектров
Владеет:	Пониманием смысла спектроскопических величин и понятий
Продвинутый	
Знает:	Основные модели описания спектров, границы их применимости
Умеет:	Учитывать особенности применения квантовых подходов к вычислению

	спектроскопических характеристик
Владеет:	Представлением об основных взаимодействиях в электронных оболочках атомов и способностью оценивать их вклад в спектр конкретного атома или иона
ПК-2: способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	
Уровень освоения	Признаки проявления
Продвинутый	
Знает	Основные методы расчета спектров атомов и ионов
Умеет	Пользоваться современным программным обеспечением для расчетов спектров конкретных атомов и ионов, существенных для процессов в природной среде
Владеет	Навыками оценки достоверности полученных результатов

В результате освоения компетенций в рамках дисциплины «Численные методы спектроскопии» обучающийся должен

знать:

- цели и задачи спектроскопического исследования состояния окружающей среды;
- основы атомной физики и квантово-механические модели атомов и ионов;
- основные представления о спектре атома;
- операторы основных внутриатомных взаимодействий, их определение, смысл, единицы измерения атомных величин
- основные модели описания спектров, границы их применимости;
- основные методы расчетов спектров атомов и ионов;
- фундаментальную роль атомной спектроскопии в развитии, физической науки в целом и квантовой физики, в частности.

уметь:

- использовать спектроскопические данные для анализа состояния окружающей среды;
- решать уравнение Шредингера для простейших атомных систем;
- сформулировать задачу спектрального исследования;
- пользоваться специальными величинами, принятыми в атомной физике;
- учитывать особенности применения квантовых подходов к вычислению спектроскопических характеристик;
- пользоваться современным программным обеспечением для расчетов спектров конкретных атомов и ионов, существенных для процессов в природной среде

владеть:

- навыками работы с научной отечественной и зарубежной информацией о спектроскопических исследованиях;
- навыками трактовки полученных спектроскопических данных для простейших атомных систем;
- навыками использования специальной научной литературы по спектроскопии;
- способностью истолковывать смысл спектроскопических величин и понятий;
- способностью объяснять явления и эффекты в электронных оболочках с позиций квантовой физики и указать, какими законами описывается данное явление или эффект;

- навыками оценки достоверности результатов численных расчетов.

Соответствие уровней освоения компетенции планируемым результатам обучения и критериям их оценивания

Этап (уровень) освоения компетенции	Основные признаки проявления компетенции (дескрипторное описание уровня)				
	1.	2.	3.	4.	5.
Уровень 1 (минимальный)	не владеет	слабо ориентируется в терминологии и содержании	Способен выделить основные идеи текста, работает с критической литературой	Владеет основными навыками работы с источниками и критической литературой	Способен дать собственную критическую оценку изучаемого материала
	не умеет	не выделяет основные идеи	Способен показать основную идею в развитии	Способен представить ключевую проблему в ее связи с другими процессами	Может соотнести основные идеи с современными проблемами
	не знает	допускает грубые ошибки	Знает основные рабочие категории, однако не ориентируется в их специфике	Понимает специфику основных рабочих категорий	Способен выделить характерный авторский подход
Уровень 2 (базовый)	не владеет	плохо ориентируется в терминологии и содержании	Владеет приемами поиска и систематизации, но не способен свободно изложить материал	Свободно излагает материал, однако не демонстрирует навыков сравнения основных идей и концепций	Способен сравнивать концепции, аргументированно излагает материал
	не умеет	выделяет основные идеи, но не видит проблем	Выделяет конкретную проблему, однако излишне упрощает ее	Способен выделить и сравнить концепции, но испытывает сложности с их практической привязкой	Аргументированно проводит сравнение концепций по заданной проблематике
	не знает	допускает много ошибок	Может изложить основные рабочие категории	Знает основные отличия концепций в заданной проблемной области	Способен выделить специфику концепций в заданной проблемной области
Уровень 3 (продвинутый)	не владеет	ориентируется в терминологии и содержании	В общих чертах понимает основную идею, однако плохо связывает ее с существующей проблематикой	Видит источники современных проблем в заданной области анализа, владеет подходами к их решению	Способен грамотно обосновать собственную позицию относительно решения современных проблем в заданной области
	не умеет	выделяет основные идеи, но не видит их в развитии	Может понять практическое назначение основной идеи, но затрудняется выявить ее основания	Выявляет основания заданной области анализа, понимает ее практическую ценность, однако испытывает затруднения в описании сложных объектов анализа	Свободно ориентируется в заданной области анализа. Понимает ее основания и умеет выделить практическое значение заданной области
	не знает	допускает ошибки при выделении рабочей области анализа	Способен изложить основное содержание современных научных идей в рабочей области анализа	Знает основное содержание современных научных идей в рабочей области анализа, способен их сопоставить	Может дать критический анализ современным проблемам в заданной области анализа

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная форма обучения
2015, 2016, 2017, 2018 годы набора

Вид учебной дисциплины	Всего часов	Семестр
Общая трудоёмкость дисциплины	108	8
Аудиторные занятия	36	8
Лекции	24	8
Практические работы	12	8
Самостоятельная работа (СР)- всего	72	8
В том числе подготовка к сдаче зачета	-	
Вид итогового контроля	зачет	8

4.1. Структура дисциплины

№ п/п	Раздел и тема дисциплины	Виды учебной работы, в т.ч. самостоятельная работа студентов, час.			Формы текущего контроля успеваемости	Занятия в активной и интерактивной форме, час.	Формируемые компетенции
		Лекции	Лабораторные работы..	Самостоятельная работа			
1	Понятие о спектре	4	-	12	Собеседование, тестовое задание	-	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
2	Классификация спектров одноэлектронных атомов	3	2	10	Собеседование, проверка подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание	2	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
3	Классификация спектров	3	2	10	Собеседование, проверка	2	ОПК-1 ОПК-3

	многоэлектронных атомов				подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание		ПК-1 ПК-2
4	Сферическая симметрия, разделение переменных	4	2	10	Собеседование, проверка подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание	2	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
5	Промежуточная схема связи	3	4	10	Собеседование, проверка подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание	4	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
6	Расчет радиальных интегралов	3	2	10	Собеседование, проверка подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание	2	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
7	Двухатомные молекулы, колебательное уравнение	4		10	Собеседование, проверка подготовки к лабораторной работе, отчет по лабораторной работе, тестовое задание		ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
	ИТОГО	24	12	72		12	

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1 *Понятие о спектре*

Уровни энергии. Спектроскопические переходы. Длина волны спектральной линии. Единицы измерения: атомные единицы, ридберги, обратные сантиметры, электрон-вольты, соотношения между ними.

Интенсивность спектральной линии. Сила линии. Вероятность перехода, единицы измерения, практические формулы. Время жизни уровня.

Раздел 2

Классификация спектров одноэлектронных атомов

Квантовые числа : главное, орбитальное, спин, полный момент.

Раздел 3

Классификация спектров многоэлектронных атомов

Понятие об электронных конфигурациях, принцип Паули. Основные и возбужденные конфигурации. Сложение угловых моментов. Различные схемы сложения угловых моментов, связь между ними.

Раздел 4

Сферическая симметрия, разделение переменных

Матричная форма уравнения Шредингера. Расчет матричных элементов операторов. Угловые части, радиальные интегралы. Операторы взаимодействий – электростатическое, спин-орбитальное. Тензорная форма операторов. Расчет матричных элементов. Операторы перехода. Сила линии. Расчет сил линий в различных схемах сложения моментов.

Раздел 5

Промежуточная схема связи

Наложение конфигураций. Расчет межконфигурационных матричных элементов. Метод наименьших квадратов. Параметры, эффективные взаимодействия.

Раздел 6

Расчет радиальных интегралов

Метод Хартри-Фока. Численные схемы реализации метода Хартри-Фока. Метод Нумерова.

Раздел 7

Двухатомные молекулы, колебательное уравнение

Межатомные потенциалы. Метод Нумерова. Узлы волновой функции. Интегрирование в одну сторону. Волновые функции дискретного и сплошного спектров.

4.3. Семинарские, практические, лабораторные занятия, их содержание

4.3.1 Лабораторные работы

№ п/п	№	Тематика лабораторных	Форма	Формируемы
--------------	----------	------------------------------	--------------	-------------------

	раздела дисциплины	занятий	проведения	е компетенции
1	2	Выбор объекта для расчета спектральных характеристик по литературным данным	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
2	2-3	Выбор схемы сложения угловых моментов с целью классификации спектра выбранного объекта, вычисление коэффициентов перехода	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
3	4	Расчет матричных элементов операторов электростатического и спин-орбитального взаимодействий, расчет сил линий	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
4	5	Расчет матричных элементов эффективных взаимодействий, расчет межконфигурационных матричных элементов	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
5		Реализация метода наименьших квадратов для выбранного объекта	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2
6	6	Расчет радиальных интегралов методом Хартри-Фока	Лабораторная работа	ОПК-1 ОПК-3 ПК-1 ПК-2

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ И ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе изучения каждого раздела в сроки, предусмотренные графиком учебного процесса на текущий год. Система, сроки и виды контроля доводятся до сведения каждого студента в начале занятий по дисциплине. В рамках текущего контроля оцениваются все виды работы студента, предусмотренные учебной программой по дисциплине.

Формами текущего контроля являются:

- собеседование (опрос на лекциях) по пройденному материалу;
- проверка степени подготовленности к лабораторным работам (допуск к лабораторным работам);
- проверка отчётов по выполнению лабораторных работ, собеседование по теоретической части лабораторных работ (защита лабораторных работ);
- проверка тестовых заданий;

Текущий контроль проводится в период аудиторной и самостоятельной работы студентов в установленные сроки по расписанию.

а) Примерный перечень вопросов для собеседования и опроса на лекциях

1. Серийные закономерности в спектре атома водорода.
2. Комбинационные закономерности в спектре атома водорода.
3. Гипотеза квантов излучения.
4. Характерные размеры атома, атомная единица длины.
5. Спектр энергий электрона, атомная единица энергии.
6. Волновое уравнение как способ математического описания атомных спектров.
7. Оператор энергии одноэлектронного атома.
8. Волновые функции одноэлектронного атома.
9. Формальный смысл квантовых чисел.
10. Возможное физическое толкование квантовых чисел.
11. Принцип Паули.
12. Заполнение электронных оболочек.
13. Электронные конфигурации.
14. Основное и возбужденные состояния.
15. Расщепление конфигурации на термы как следствие электростатического взаимодействия электронов.
16. Сложение угловых моментов как способ математического описания системы термов.
17. Тонкая структура спектров как следствие спин-орбитального взаимодействия.
18. Матричная форма волнового уравнения как один из способов его решения.
19. Матричные элементы операторов.
20. Разложение матричных элементов операторов на угловые и радиальные части как следствие сферической симметрии атома.
21. Тензорная форма операторов взаимодействий.
22. Вычисление угловых частей.
23. Различные схемы сложения угловых моментов как следствие соотношения различных взаимодействий в электронной оболочке.
24. Наложение конфигураций как способ решения волнового уравнения.
25. Наложение конфигураций как уточненное приближение.
26. Полуэмпирическое приближение.
27. Метод наименьших квадратов.
28. Радиальные интегралы как параметры.
29. *Ab initio* методы.
30. Вариационный принцип.
31. Метод Хартри-Фока.
32. Метод Нумерова.
33. Электронные термы двухатомных молекул.
34. Колебательное уравнение.
35. Квантовое колебательное число и узлы волновой функции.
36. Метод Нумерова применительно к колебательному уравнению.
37. Метод «стрельбы» - интегрирование в одну сторону.
38. Дискретный и сплошной спектры.

б) Примерный перечень вопросов тестового задания

Раздел 1

Частоты линий излучения в спектре атома водорода:

1. никак не связаны между собой;
2. могут быть представлены в виде сумм частот других линий.

Раздел 2

Энергия электрона в одноэлектронном атоме зависит:

1. от одного квантового числа;
2. от трех квантовых чисел;
3. от пяти квантовых чисел.

Раздел 3

Расщепление конфигурации на термы есть следствие:

1. электростатического взаимодействия электронов между собой;
2. электростатического взаимодействия электронов с ядром;
3. спин-орбитального взаимодействия.

Раздел 4

Разложение матричных элементов операторов на угловые и радиальные части есть следствие:

1. сферической симметрии;
2. цилиндрической симметрии;
3. формальный математический прием.

Раздел 5

Лучше всего отвечает физическому смыслу термин:

1. взаимодействие конфигураций;
2. наложение конфигураций;
3. перемешивание конфигураций.

Раздел 6

Волновое уравнение является дифференциальным уравнением:

1. первого порядка;
2. второго порядка;
3. третьего порядка.

Раздел 7

Физический смысл понятия электронный терм это:

1. кинетическая энергия электронов;
2. кинетическая энергия ядер;
3. потенциальная энергия положительно заряженных ядер;
4. потенциальная энергия электронов.

5.2. Методические указания по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа студентов является составной частью учебной работы и имеет целью закрепление и углубления полученных знаний и навыков, поиск и

приобретение новых знаний, а также выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям, тестовым заданиям, зачету.

Самостоятельная работа предусматривает, как правило, выполнение вычислительных работ, графических заданий к лабораторным работам, подготовку к опросу на лекциях.

Работа с литературой предусматривает самостоятельное изучение теоретического материала, подготовку к лабораторным работам.

5.3. Промежуточный контроль: Зачет после освоения дисциплины в конце 8 семестра. К зачету допускаются студенты, выполнившие все требования учебной программы и сдавшие все лабораторные работы и тестовые задания.

Перечень вопросов к зачету

1. Сериальные закономерности в спектре атома водорода.
2. Комбинационные закономерности в спектре атома водорода.
3. Гипотеза квантов излучения.
4. Характерные размеры атома, атомная единица длины.
5. Спектр энергий электрона, атомная единица энергии.
6. Волновое уравнение как способ математического описания атомных спектров.
 1. Оператор энергии одноэлектронного атома.
 2. Волновые функции одноэлектронного атома.
 3. Формальный смысл квантовых чисел.
 4. Возможное физическое толкование квантовых чисел.
 5. Принцип Паули.
 6. Заполнение электронных оболочек.
 7. Электронные конфигурации.
 8. Основное и возбужденные состояния.
 9. Расщепление конфигурации на термы как следствие электростатического взаимодействия электронов.
 10. Сложение угловых моментов как способ математического описания системы термов.
 11. Тонкая структура спектров как следствие спин-орбитального взаимодействия.
 12. Матричная форма волнового уравнения как один из способов его решения.
 13. Матричные элементы операторов.
 14. Разложение матричных элементов операторов на угловые и радиальные части как следствие сферической симметрии атома.
 15. Тензорная форма операторов взаимодействий.
 16. Вычисление угловых частей.
 17. Различные схемы сложения угловых моментов как следствие соотношения различных взаимодействий в электронной оболочке.
 24. Наложение конфигураций как способ решения волнового уравнения.
 25. Наложение конфигураций как уточненное приближение.
 26. Полуэмпирическое приближение.
 27. Метод наименьших квадратов.
 28. Радиальные интегралы как параметры.
 29. *Ab initio* методы.
 30. Вариационный принцип.
 31. Метод Хартри-Фока.
 32. Метод Нумерова.
 33. Электронные термы двухатомных молекул.
 34. Колебательное уравнение.

35. Квантовое колебательное число и узлы волновой функции.
36. Метод Нумерова применительно к колебательному уравнению.
37. Метод «стрельбы» - интегрирование в одну сторону.
38. Дискретный и сплошной спектры.

Образцы билетов для проведения зачета

*Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»*

03.03.02 – Физика (академический бакалавриат)

Билет № 1

Дисциплина «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ СПЕКТРОСКОПИИ»

1. Атомная система единиц.
2. Промежуточная схема связи.
3. Термы двухэлектронного атома.

Экзаменатор _____

Заведующий кафедрой физики _____

Протокол заседания кафедры № г.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Рекомендуемая литература

а) основная литература

1. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. 2-е изд. Изд-во «Лань», 2010, 640 с.
2. Бейман Б.Ф. Применение теории групп в ядерной спектроскопии. М.: ГИФМЛ, 1961. 226 с.
3. Юцис А.П., Левинсон И.Л., Ванагас . Математический аппарат теории момента количества движения. Вильнюс, 1960. 243 с.
4. Пивоваров С.С. Физические основы теории оптической и рентгеновской спектроскопии. Изд-во Санкт-Петербургского государственного университета, 2016 , 64 с.
5. Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории спектров атомов и ионов. М.: Наука, 1983. 320 с.
6. Джадд Б., Вайборн Б. Теория сложных атомных спектров. М.: Мир, 1973. 296 с.
7. Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: ИЛ, 1960. 271 с.

б) дополнительная литература

1. Ландау Л.Д, Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: ГИФМЛ, 1963. 704 с.
2. Борн М. Атомная физика. М.: Мир, 1965. 483 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. NIST Atomic Database (ver. 5.2). [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd>[2015, October 8].

7. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекции	В ходе лекционных занятий необходимо вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на формулировки физических законов, процессов, явлений. Подробно записывать математические выводы формул. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений.
Лабораторная работа	Лабораторные занятия имеют целью практическое освоение студентами научно-теоретических положений изучаемой дисциплины, овладение ими техникой экспериментальных (расчетных) исследований и анализа полученных результатов, привитие навыков работы с лабораторным оборудованием, контрольно-измерительными приборами и вычислительной техникой. По выполнению лабораторной работы студенты представляют отчет и защищают его. Защищенные отчеты студентов хранятся на кафедре до завершения изучения дисциплины.
Внеаудиторная работа	представляет собой вид занятий, которые каждый студент организует и планирует самостоятельно. Самостоятельная работа студентов включает: – самостоятельное изучение разделов дисциплины; – подготовка к выполнению лабораторных работ, выполнение вычислительных и графических заданий к лабораторным работам; – подготовка к сдаче зачета.
Подготовка к зачету	Зачет служит формой проверки выполнения студентами лабораторных работ, усвоения лекционного материала. Зачет имеет целью проверить и оценить уровень теоретических знаний, степень

	<p>овладения практическими умениями и навыками в объеме требований учебных программ.</p> <p>Подготовка к зачету предполагает изучение конспектов лекций, рекомендуемой литературы и других источников, повторение материалов лабораторных занятий.</p>
--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

8. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ (ПРИ НЕОБХОДИМОСТИ)

№ п/п	Тема (раздел) дисциплины	Образовательные и информационные технологии	Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем
1	Понятие о спектре	Лекции, собеседование, самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет-портал. URL: www.chemport.ru .
2	Классификация спектров одноэлектронных атомов	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, , самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет-портал. URL: www.chemport.ru .
3	Классификация спектров многоэлектронных атомов	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, , самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет-портал. URL: www.chemport.ru .
4	Сферическая симметрия, разделение переменных	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, , самостоятельная	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет-

		работа студентов	портал. URL: www.chemport.ru .
5	Промежуточная схема связи	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, , самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет- портал. URL: www.chemport.ru .
6	Расчет радиальных интегралов	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, , самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет- портал. URL: www.chemport.ru .
7	Двухатомные молекулы, колебательное уравнение	Лекции, лабораторные занятия, отчет по лабораторной работе собеседование, самостоятельная работа студентов	Microsoft Windows Microsoft Office: Word, Excel PowerPoint; ЭБС РГГМУ https://bibliotech.esstu.ru Химический Интернет- портал. URL: www.chemport.ru .

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Учебные поточные аудитории;
2. Компьютерный класс
3. Мультимедийная техника и презентации.
4. Электронно-библиотечная система РГГМУ <https://bibliotech.esstu.ru>