

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ  
Кафедра физики

Рабочая программа дисциплины

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ И АЭРОЗОЛЬНАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ**

Основная профессиональная образовательная программа  
высшего образования по направлению подготовки

**03.03.02 «Физика»**

Направленность (профиль):

**Физические исследования природных процессов**

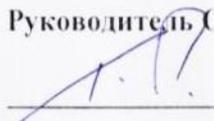
Уровень:

**Бакалавриат**

Форма обучения

**Очная**

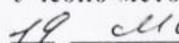
Согласовано  
Руководитель ОПОП

 Бобровский А.П.

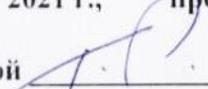
Председатель УМС

 М.И. Палкин

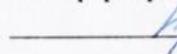
Рекомендована решением  
Учебно-методического совета

 29 мая 2021 г., протокол № 8

Рассмотрена и утверждена на заседании кафедры  
13 апреля 2021 г., протокол № 8

Зав. кафедрой  Бобровский А.П.

Автор-разработчик:

 Потимова И.А.

Рассмотрено и рекомендовано к использованию в учебном процессе на \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_  
учебный год без изменений\*

**Протокол заседания кафедры \_\_\_\_\_ от \_\_.\_\_.20\_\_ №\_\_**

Рассмотрено и рекомендовано к использованию в учебном процессе на \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_  
учебный год с изменениями (см. лист изменений)\*\*

**Протокол заседания кафедры \_\_\_\_\_ от \_\_.\_\_.20\_\_ №\_\_**

\*Заполняется при ежегодном пересмотре программы, если в неё не внесены изменения

\*\* Заполняется при ежегодном пересмотре программы, если в неё внесены изменения

## 1. Цель и задачи освоения дисциплины

**Целью** дисциплины «Молекулярная и аэрозольная спектromетрия» 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.

### Задачи:

- ознакомление с теоретическими подходами к описанию спектров атомов и ионов, моделями и способами вычисления основных спектроскопических характеристик, анализом полученных данных,
- формирование навыков решения основных задач молекулярной и аэрозольной спектromетрии, анализа физического смысла полученных решений

## 2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина «Молекулярная и аэрозольная спектromетрия» (Б1.В.10) 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 «Молекулярная и аэрозольная спектromетрия» изучается параллельно с дисциплиной «Теория переноса электромагнитных волн в газах» и используется при написании выпускной квалификационной работы бакалавра.

## 3. Перечень планируемых результатов обучения

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование компетенции ПК-1.

Таблица 1.

### Общепрофессиональные компетенции

Код и наименование универсальной компетенции	Код и наименование индикатора достижения универсальной компетенции	Результаты обучения
ПК-1 Способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	ПК-1.1 Умеет строить физические и математические модели для решения задач профессиональной деятельности.	<b>Знать:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>– основные представления о спектре атома, единицы измерения атомных величин;</li><li>– внутриатомные взаимодействия и соответствующие им операторы;</li><li>– основные модели описания спектров, границы их применимости.</li></ul> <b>Уметь:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>– формулировать задачу спектрального исследования;</li><li>– пользоваться специальными величинами, принятыми для описания атомных спектров</li><li>– учитывать особенности применения квантовых подходов к вычислению</li></ul>

		<p>спектроскопических характеристик.</p> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– навыками использования специальной научной литературы по спектроскопии;</li> <li>– пониманием смысла спектроскопических величин и понятий;</li> <li>– представлением об основных взаимодействиях в электронных оболочках атомов и способностью оценивать их вклад в спектр конкретного атома или иона.</li> </ul>
	<p>ПК-1.2 Владеет навыками построения физических и математических моделей для решения задач при физических исследованиях природных процессов.</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Основные методы расчета спектров атомов и ионов;</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– пользоваться современным программным обеспечением для расчетов спектров конкретных атомов и ионов, существенных для процессов в природной среде;</li> <li>– строить физические модели электродинамических явлений, понимает границы их применимости;</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– навыками анализа и оценки достоверности полученных результатов.</li> </ul>

#### 4. Структура и содержание дисциплины

##### 4.1. Объем дисциплины

Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов

Таблица 2.

Объем дисциплины по видам учебных занятий в академических часах

Объём дисциплины	Всего часов
	Очная форма обучения
Объем дисциплины	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам аудиторных учебных занятий) – всего:	70
в том числе:	

лекции	42
занятия семинарского типа:	
практические занятия	
лабораторные занятия	28
<b>Самостоятельная работа</b> (далее – СРС) – <b>всего:</b>	<b>38</b>
в том числе:	
курсовая работа	
контрольная работа	
<b>Вид промежуточной аттестации</b>	<b>Зачет (8 семестр)</b>

#### 4.2. Структура дисциплины

Таблица 3.

Структура дисциплины для очной формы обучения

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, в т.ч. самостоятельная работа студентов, час.			Формы текущего контроля успеваемости	Формируемые компетенции	Индикаторы достижения
		Лекции	Лабораторные работы..	Самостоятельная работа			
1	Понятие о спектре	4	6	5	Собеседование, тестовое задание	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
2	Классификация спектров одноэлектронных атомов	4	8	5	Собеседование, лабораторная работа, тестовое задание	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
3	Классификация спектров многоэлектронных атомов	6	6	5	Устный опрос 1, лабораторная работа, тестовое задание	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
4	Сферическая симметрия, разделение переменных	8	-	6	Собеседование, лабораторная работа, тестовое задание, реферат	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
5	Промежуточная схема связи	6	-	5	Собеседование, лабораторная работа, тестовое задание, реферат	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
6	Расчет радиальных интегралов	8	-	6	Устный опрос 2, лабораторная работа, тестовое задание, реферат	ПК-1	ПК-1.1 ПК-1.2
7	Двухатомные	6	8	6	Собеседование,	ПК-1	ПК-1.1

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, в т.ч. самостоятельная работа студентов, час.			Формы текущего контроля успеваемости	Формируемые компетенции	Индикаторы достижения
		Лекции	Лабораторные работы..	Самостоятель ная работа			
	молекулы, колебательное уравнение				лабораторная работа, тестовое задание		ПК-1.2
	<b>Итого: 108</b>	<b>42</b>	<b>28</b>	<b>38</b>			

#### 4.3. 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 Лабораторные работы

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тематика лабораторных занятий	Форма проведения	Формируемые компетенции
1	1	Определение длин волн излучения водорода в видимой области	Лабораторная работа	ПК-1.1 ПК-1.2
2	2	Определение частот волн в видимой области спектра водорода	Лабораторная работа	ПК-1.1 ПК-1.2
3	3	Определение энергии энергетических переходов в видимой области спектра водорода	Лабораторная работа	ПК-1.1 ПК-1.2
4	7	Идентификация газов с помощью спектрального анализа	Лабораторная работа	ПК-1.1 ПК-1.2

## 5. Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

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, экзаменам.

Самостоятельная работа предусматривает, как правило, выполнение вычислительных работ, графических заданий к лабораторным работам, подготовку к практическим заданиям, контрольных работ.

Работа с литературой предусматривает самостоятельное изучение теоретического материала, разработку рефератов и других творческих заданий.

При самостоятельной работе над разделами дисциплины, при выполнении практических работ, при подготовке к тестам, опросам и к промежуточному контролю

студент должен изучить соответствующие разделы основной и вспомогательной литературы по дисциплине, а также использовать указанные в перечне интернет-ресурсы.

В процессе самостоятельной учебной деятельности формируются умения: анализировать свои познавательные возможности и планировать свою познавательную деятельность; работать с источниками информации: текстами, таблицами, схемами; анализировать полученную учебную информацию, делать выводы; анализировать и контролировать свои учебные действия; самостоятельно контролировать полученные знания.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

Учет успеваемости обучающегося по дисциплине осуществляется по 100-балльной шкале.

Максимальное количество баллов по дисциплине за один семестр – 100:

- максимальное количество баллов за выполнение всех видов текущего контроля - 60;
- максимальное количество баллов за посещение лекционных занятий - 10;
- максимальное количество баллов за прохождение промежуточной аттестации - 30;

### **6.1. Текущий контроль**

Типовые задания, методика выполнения и критерии оценивания текущего контроля по разделам дисциплины представлены в Фонде оценочных средств по данной дисциплине.

### **6.2. Промежуточная аттестация**

Форма промежуточной аттестации по дисциплине – **Зачет после 8-го семестра.**

Форма проведения зачета: устно по билетам

**Перечень примерных вопросов для подготовки к зачету (8 семестр):**

#### ПК-1.

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.
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.

а). Образцы тестовых заданий текущего контроля

## ПРИМЕР ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ ПО КУРСУ «МОЛЕКУЛЯРНАЯ И АЭРОЗОЛЬНАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ»

### 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.

### 6.3. Балльно-рейтинговая система оценивания

Таблица 7.

Распределение баллов по видам учебной работы (8 семестр)

Вид учебной работы, за которую ставятся баллы	Баллы
Посещение лекционных занятий	0-10
Устный опрос № 1 № 2	0-10
Тест №1	0-5
Реферат	0-5
Выполнение лабораторных работ № 1-7 Задание не выполнено -0 Допуск к работе (письменная подготовка) 3 балла Выполнение работы 2 балла Подготовка отчета 3 балла Защита теории 2 балла	0-40
Промежуточная аттестация	0-30
<b>ИТОГО</b>	<b>0-100</b>

Таблица 8.

Минимальное количество баллов для допуска до промежуточной аттестации составляет 40 баллов при условии выполнения всех видов текущего контроля.

Таблица 7.

Балльная шкала итоговой оценки на экзамене (5 семестр)

Оценка	Баллы
отлично	85-100

хорошо	65-84
удовлетворительно	40-64
Не удовлетворительно	0-39

## 7. Методические рекомендации для обучающихся по освоению дисциплины

Методические рекомендации ко всем видам аудиторных занятий, а также методические рекомендации по организации самостоятельной работы, в том числе по подготовке к текущему контролю и промежуточной аттестации представлены в Методических рекомендациях для обучающихся по освоению дисциплины «Молекулярная и аэрозольная спектроскопия».

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекции	В ходе лекционных занятий необходимо вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на формулировки основных дефиниций, 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.
Внеаудиторная работа	Представляет собой вид занятий, которые каждый студент организует и планирует самостоятельно. Самостоятельная работа студентов включает: – самостоятельное изучение разделов дисциплины; выполнение вычислительных и графических заданий подготовку к практическим занятиям, решение индивидуальных задач; – выполнение дополнительных индивидуальных творческих заданий; – подготовку рефератов, сообщений и докладов.
Подготовка к экзамену	Экзамен имеет целью проверить и оценить уровень теоретических знаний, умение применять их к решению практических задач, а также степень овладения практическими умениями и навыками в объеме требований учебных программ. Подготовка к экзамену предполагает изучение конспектов лекций, рекомендуемой литературы и других источников, повторение материалов практических занятий К экзамену допускаются студенты, выполнившие все требования учебной программы

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 8.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

#### а) основная литература

1. Wybourne B.G. Spectroscopic Properties of Rare Earths. N.Y.:Wiley, 1965. 236 p.
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. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1978. :630 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.

## 8.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

1. <http://pskgu.ru/ebooks/okfizikc.html> Учебные пособия по общей физике.
2. NIST Atomic Database (ver. 5.2). [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd/2015>, October 8].
3. <http://pskgu.ru/ebooks/tf.html> . Теоретическая физика.
4. <http://physics.nad.ru/> - физика в анимациях
5. <http://dmitryukts.narod.ru/kopilka/video.html>- опыты по физике.
6. <https://sites.google.com/site/rggmustud/> Актуальная информация для студентов, проходящих обучение физике в РГГМУ.

## 8.3. Перечень программного обеспечения

1. Microsoft Office — офисный пакет приложений
2. Пакет MS Office, образовательные ресурсы Интернета.

## 8.4. Перечень информационных справочных систем

1. Электронная библиотека ЭБС «Znanium» (<http://znanium.com/>)
2. Электронная библиотека ЭБС «Юрайт» (<https://biblio-online.ru/>)
3. Информационная система доступа к российским физическим журналам и обзорам ВИНИТИ РАН (<http://www.viniti.ru>).
4. ЭБС Лань Коллекция «Инженерно-технические науки – Издательство Горячая линия- Телеком <https://e.lanbook.com/books/931?publisher=6171>

## 8.5. Перечень профессиональных баз данных

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - <https://www.elibrary.ru/>
2. Электронная библиотечная система РГГМУ «ГидрометеоОнлайн» - <http://elib.rshu.ru/>

## 9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – укомплектована специализированной (учебной) мебелью, набором демонстрационного оборудования и учебно-наглядными пособиями, обеспечивающими тематические иллюстрации, соответствующие рабочим учебным программам дисциплин (модулей).

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.

Лаборатория механики и молекулярной физики, лаборатория электричества и магнетизма, лаборатория оптики и ядерной физики – укомплектованы специализированной (учебной) мебелью, приборами, оборудованием, лабораторными установками, стендами, техническими средствами обучения для проведения лабораторных работ.

Учебная аудитория для групповых и индивидуальных консультаций - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.

Учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.

Помещение для самостоятельной работы – укомплектовано специализированной (учебной) мебелью, оснащено компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечено доступом в электронную информационно-образовательную среду организации

#### **10. 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.

#### **11. Возможность применения электронного обучения и дистанционных образовательных технологий**

Дисциплина может реализовываться с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.