



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФГБОУ ВПО «ИГУ»

Кафедра экспериментальной физики



УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной работе

Рабчиков В.В.

май 2014 г.

Рабочая программа дисциплины

Код дисциплины **БЗ.В.ДВ.11.1**

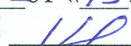
Наименование дисциплины **Методы физико-химического исследования материалов (спектроскопия)**

Рекомендуется для направлений подготовки

011200.62 **Физика**

Степень (квалификация) выпускника **бакалавр**

Согласовано с УМК факультета (института)

Протокол № 32 от «15» мая 2014 г.  
Председатель 

Рекомендовано кафедрой:

Протокол № 9  
От «29» апреля 2014 г.

Зав.кафедрой  **Раджабов Е.А.**

Иркутск 2014 г.

## Содержание

стр.

1. Цели и задачи дисциплины (модуля)
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины (модуля)
  - 5.1 Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)
  - 5.2 Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)
  - 5.3 Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий
6. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.
7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):
  - а) основная литература;
  - б) дополнительная литература;
  - в) программное обеспечение;
  - г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).
10. Образовательные технологии
11. Оценочные средства. (ОС).

**1. Цели и задачи дисциплины (модуля):**

Усвоение знаний необходимых для понимания природы оптических спектров в конденсированных средах с атомарными и молекулярными примесями

**2. Место дисциплины в структуре ООП:**

к базовой части образовательной программы

**3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля):**

Процесс изучения дисциплины (модуля) направлен на формирование следующих компетенций:

Общекультурные компетенции (ОК): ОК-1, ОК-5, ОК-18, ОК-20, ОК-21

Профессиональные компетенции (ПК): ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.

В результате изучения дисциплины студент должен:

**Знать:** Основы: химической связи в молекулах; основные типы взаимодействий в атомах и молекулах (обменное, спин-орбитальное); качественные аспекты теории кристаллического поля и поля лигандов; теории групп; систематики спектральных термов и правил отбора для электронных переходов.

**Уметь:** применять основы полученных знаний для классификации электронных состояний и интерпретации оптических спектров атомных и молекулярных примесей в конденсированных средах

**Владеть:** навыками работы на современных спектрометрах и спектрофотометрах

**4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы (разделяется по формам обучения)**

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Семестры			
		8			
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>					
В том числе:	-	-	-	-	-
Лекции	34	34			
Практические занятия (ПЗ)	17	17			
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	17	17			
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>					
В том числе:	-	-	-	-	-
Курсовой проект (работа)					

Расчетно-графические работы					
Реферат (при наличии)					
<i>Другие виды самостоятельной работы</i>					
Вид промежуточной аттестации зачет	6	6			
Общая трудоемкость	часы	74	74		
	зачетные единицы	2	2		

## 5. Содержание дисциплины (модуля)

### 5.1. Содержание разделов и тем дисциплины (модуля). Все разделы и темы нумеруются.

1. Типы уровней.
2. Орбитали
3. Термы.
4. Правила отбора.
5. Водородоподобные атомы.
6. Спектр гелия.
7. Спин-орбитальное взаимодействие,
8. Тонкая структура термов.
9. Обменное взаимодействие.
10. Кристаллическое поле.
11. Теория поля лигандов.
12. Орбитали двухатомных молекул.
13. Метод ЛКАО.
14. Гетероядерные молекулы
15. Молекулярные орбитали H<sub>2</sub>O.
16. Прямые произведения.
17. Корреляционные диаграммы
18. Примесная молекула в кристалле.

### 5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№ № разделов и тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин (вписываются разработчиком)									
1.	Атомная физика										
2.	Квантовая механика										
3.	Физика твердого тела										

### 5.3. Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий

№	Наименов	Наименование темы	Виды занятий в часах
---	----------	-------------------	----------------------

п/п	ание раздела		Лекц.	Практ зан.	Семина	Лаб. зан.	СРС	Всего
1.	Типы уровней	Типы уровней и переходов (электронные, колебательные, вращательные)	2	1		1	1	5
2.	Орбитали	Электронные волновые функции. Форма атомных орбиталей атомные квантовые числа.	2	1		1	2	6
3.	Термы	Обозначения спектроскопических термов	2	1		1	1	5
4	Правила отбора	Электронные переходы, правила отбора, сила осциллятора перехода	2	1		1	2	6
5	Водородоподобные атомы	Спектры водородоподобных атомов, обозначение уровней	1	1		1	1	4
6	Спектр гелия	Спектр гелия и щелочноземельных металлов	1	1		1	1	4
7	Спин-орбитальное взаимодействие	Природа спин-орбитального взаимодействия, простая модель и ее следствия	2	1		1	2	6
8	Тонкая структура термов	Спин-орбитальная константа, тонкая структура термов $s_1$ и $s_2$ атомов	2	1		1	2	6
9	Обменное взаимодействие	Природа синглет-триплетного расщепления (обменное взаимодействие)	2	1		1	1	5
10	Кристаллическое поле	Изменение атомных состояний кристаллическим полем	2	1		1	1	5
11	Теория поля лигандов	Теория поля лигандов. Сильное и слабое поле лигандов. Октаэдрические комплексы	2	1		1	2	6
12	Орбитали двухатомных молекул	Разделение электронного и ядерного движений. Молекулярные орбитали двухатомных молекул	2	1		1	1	5
13	Метод ЛКАО	Обоснование метода ЛКАО. Применение метода к молекулам от $Li_2$ до $F_2$	2	1		1	2	6
14	Гетероядерные молекулы	Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул	2	1		1	1	5
15	Молекулярные орбитали	Ограничения налагаемые симметрией на	2	1		1	2	6

	H <sub>2</sub> O	молекулярные орбитали 1 (для H <sub>2</sub> O)						
16	Прямые произведения	Прямые произведения. Правила отбора для дипольных переходов в группе симметрии C <sub>2v</sub>	2	1		1	1	5
17	Корреляционные диаграммы	Корреляционные диаграммы двух и трехатомных молекул. Правило непересечения. Спектры H <sub>2</sub> O, NH <sub>3</sub> , молекулы бензола C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	2	1		1	1	5
18	Примесная молекула в кристалле	Примесная молекула в кристалле. Молекулярные орбитали V <sub>k</sub> центров. Экситоны в кристаллах конденсированных газов, щелочно-земельных фторидов, щелочно-галогенидных кристаллах	2				2	4
	Зачет							6
	Всего		34	17		17	26	100

### 6. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	Редкоземельные ионы	Фотолюминесценция редкоземельных ионов	6	Отчет	ПК-1 ПК-2
2.	Спектры возбуждения	Спектры возбуждения редкоземельных ионов	6	Отчет	ПК-3 ПК-4 ОК-1 ОК-5
3.	Кинетика люминесценции	Кинетика затухания люминесценции редкоземельных ионов	6	Отчет	ОК-18 ОК-20 ОК-21

### 7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) \_\_\_\_\_

### 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

## а) основная литература

1. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. "Мир", М. 1980, 382 с.
2. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. "Мир", М., 1985, 384 с.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия М., ГИФМЛ., 1962, 892с. Переиздание – М., Эдиториал УРСС, 2001, 894с.

## б) дополнительная литература

1. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений\_ Введение в теорию., Ленинград, "Химия", 1986, 288 с.
2. МакГлинн С., Адзуми Т., Киносита М. Молекулярная спектроскопия триплетного состояния. – М.: Мир, 1972. – 448 с.
3. Герцберг Г Спектры многоатомных молекул 1968
4. Фано У., Фано Л. Физика атомов и молекул М., Наука 1980, 656 с.

## в) программное обеспечение \_\_\_\_\_

## г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы\_

Раздел люминесценция физической энциклопедии

[http://www.femto.com.ua/articles/part\\_1/2015.html](http://www.femto.com.ua/articles/part_1/2015.html)

**9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):****Оборудование**

Для практических работ по изучению оптических спектров редкоземельных ионов в кристаллах используется Люминесцентный спектрометр **LS-55** производства компании **PerkinElmer**. Спектрометр предназначен для регистрации спектров возбуждения и люминесценции и может работать в одном из четырёх режимов – флуоресценции, фосфоресценции, хеми- или биолюминесценции.

**Основные технические характеристики**

Однолучевой люминесцентный спектрофотометр, работает в режимах флуоресценции, фосфоресценции, хеми- или биолюминесценции с импульсным ксеноновым источником излучения.

Область длин волн: возбуждение 200 – 800 нм

эмиссия 200 – 650 нм

Спектральная ширина щели: возбуждение 2.5 – 15 нм

эмиссия 2.5 – 20 нм

инкремент  $\pm 0.1$  нм

Точность установки длины волны:  $\pm 1.0$  нм

Воспроизводимость установки длины волны:  $\pm 0.5$  нм

**Материалы**

Для практических работ по изучению оптических спектров редкоземельных ионов в кристаллах необходимы набор кристаллов с различным содержанием ионов редких земель —  $\text{Ce}^{3+}$ ,  $\text{Pr}^{3+}$  и др. с концентрацией от 0.1 до 1-3 моль. %. Кристаллы выращены в институте геохимии СО РАН.

**10. Образовательные технологии:**

## 11. Оценочные средства (ОС):

11.1. Оценочные средства для входного контроля (могут быть в виде тестов с закрытыми или открытыми вопросами).

11.2. Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета (могут быть в виде тестов, ситуационных задач, деловых и ролевых игр, диспутов, тренингов и др. Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность компетенций - указать каких конкретно).

11.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации (в форме экзамена или зачета).

### Примерный список вопросов к зачету

Билет 1

1. Типы уровней и переходов (электронные, колебательные, вращательные, тонкой структуры, сверхтонкой, суперсверхтонкой).

2. Разделение электронного и ядерного движений. Молекулярные орбитали двухатомных молекул.

Билет 2

1. Электронные волновые функции. Форма атомных орбиталей атомные квантовые числа. Уровни атома водорода.

2. Обоснование метода ЛКАО. Применение метода к молекулам от  $Li_2$  до  $F_2$ .

Билет 3

1. Обозначения спектроскопических термов.

2. Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул.

Билет 4

1. Электронные переходы, правила отбора, сила осциллятора перехода.

2. Ограничения налагаемые симметрией на молекулярные орбитали (для  $H_2O$ ).

Билет 5

1. Спектры водородоподобных атомов, обозначение уровней.

2. Прямые произведения. Правила отбора для дипольных переходов в группе симметрии  $C_{2v}$ .

Билет 6

1. Спектр гелия и щелочноземельных металлов.

2. Изменение молекулярных состояний кристаллическим полем. Молекулярные орбитали  $V_k$ -центров, экситонов...

Билет 7

1. Природа спин-орбитального взаимодействия, простая модель и ее следствия,

2. Разделение электронного и ядерного движений. Молекулярные орбитали двухатомных молекул.

Билет 8

1. Спин-орбитальная константа, тонкая структура термов  $s_1$  и  $s_2$  атомов.

2. Обоснование метода ЛКАО. Применение метода к молекулам от  $Li_2$  до  $F_2$ .

Билет 9

1. Природа синглет-триплетного расщепления (обменное взаимодействие). Симметричные и антисимметричные волновые функции.

2. Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул.

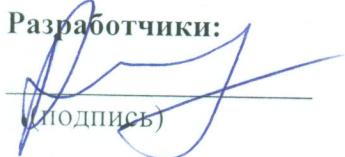
Билет 10

1. Изменение атомных состояний кристаллическим полем.

2. Ограничения налагаемые симметрией на молекулярные орбитали (для  $H_2O$ ).



**Разработчики:**

  
\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
профессор  
\_\_\_\_\_  
(занимаемая должность)

\_\_\_\_\_  
Е.А. Раджабов  
\_\_\_\_\_  
(инициалы, фамилия)

Программа рассмотрена на заседании \_\_\_\_\_ кафедры экспериментальной физики \_\_\_\_\_  
(наименование)

«\_29\_» \_\_\_\_\_ апреля \_\_\_\_\_ 2014 г.

Протокол № \_9\_ Зав.кафедрой \_\_\_\_\_ Раджабов Е.А.

