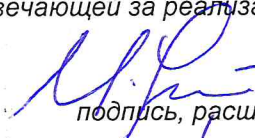


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
теоретической физики  
наименование кафедры, отвечающей за реализацию дисциплины

 (Фролов М.В.)  
подпись, расшифровка подписи

.2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Б1.В.05 – Теоретическая молекулярная спектроскопия

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

03.03.02 – физика

2. Профиль подготовки/специализация: Физика лазерных и спектральных технологий

3. Квалификация выпускника: бакалавр

4. Форма обучения: очная (дневная)

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 0802 – теоретической физики

6. Составители программы Корнеев Алексей Станиславович

Ф.И.О.

д.ф.-м.н.

доцент

ученая степень

ученое звание

7. Рекомендована: НМС физического факультета от 25.05.2023 г. протокол № 5  
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

8. Учебный год: 2026 - 2027

Семестр(ы)/Триместр(ы): 7

**9. Цели и задачи учебной дисциплины:** Данный спецкурс имеет цель познакомить студентов, обучающихся по направлению «Физика» (профиль «Физика лазерных и спектральных технологий»), с местом и ролью молекулярной спектроскопии в современной науке. Задача спецкурса - обеспечить умение применять, знания, полученные при изучении базовых физических дисциплин - "Электродинамика", "Квантовая теория", и дисциплины по выбору "Основы атомной спектроскопии" при рассмотрении теории и практики молекулярных спектров. Дать основные представления о строении электронных слоев и оболочек молекул, о методах описания частот и интенсивностей переходов.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** Дисциплина "Теоретическая молекулярная спектроскопия" относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1. Является дисциплиной, формирующей профессиональные компетенции, предусмотренные квалификацией выпускника данного направления.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:**

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-5	Способность проводить экспериментальную проверку выбранных технологических решений производства приборов и исследование параметров наноструктурных материалов спектральными методами	ПК-5.1	Организует и контролирует экспериментальные проверки разработанных технологических процессов	<p>Знать: теорию взаимодействия электромагнитного излучения с двухатомными молекулами, используя квантово-механические подходы;</p> <p>Уметь: использовать полученные знания для интерпретации спектров поглощения двухатомных молекул;</p> <p>Владеть: знаниями о технике молекулярной спектроскопии, о физических процессах, происходящих при взаимодействии оптического излучения с двухатомными молекулами</p>
		ПК-5.2	Разрабатывает программы проведения экспериментов в соответствии с утвержденной методикой проверки технологических процессов	
		ПК-5.3	Составляет перечень параметров, подлежащих контролю и измерению при проведении технологических процессов и анализе используемых материалов	

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.** (в соответствии с учебным планом) — 3 / 108.

**Форма промежуточной аттестации**(зачет/экзамен) зачет

### 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			7	
Аудиторные занятия		72	72	
в том числе:	Лекции	36	36	
	практические	18	18	
	лабораторные			
	групповые консультации	18	18	
Самостоятельная работа		36	36	
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен – __ час.)		Зачет	Зачет	
Итого:		108	108	

#### 13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК*
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Введение. Виды движения в молекуле.	Разделение энергии молекулы на части. Порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергий. Зависимость электронной энергии молекул от расстояния между ядрами.	-
1.2	Колебания двухатомных молекул.	Колебания двухатомной молекулы. Гармоничность и ангармоничность колебаний.	-
1.3	Классификация электронных состояний двухатомных молекул.	Классификация электронных состояний двухатомных молекул. Спектроскопические символы.	-
1.4	Электронные состояния двухатомных молекул.	Электронные состояния в двухатомных молекулах. Молекулярные термы.	
1.5	Характеристики отдельных электронов и молекулярные оболочки.	Электронные оболочки и химическая связь в молекулах, состоящих из двух одинаковых атомов.	-
1.6	Колебания и вращения в молекулах.	Колебательно-вращательное движение в двухатомной молекуле. Вращательная структура электронно-колебательных полос.	-
1.7	Химическая связь в молекулах.	Ковалентная химическая связь, гибридизация.	-
1.8	Электронные переходы в молекулах.	Приближение Борна–Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона.	-
1.9	Спектры многоатомных молекул.	Нормальные колебания. Колебательные спектры многоатомных молекул.	
<b>2. Практические занятия</b>			
2.1	Колебания двухатомных молекул.	Простейшие модели ангармонических колебаний.	-

2.2	Классификация электронных состояний двухатомных молекул.	Классификация электронных состояний двухатомных молекул. Спектроскопические символы.	-
2.3	Электронные состояния двухатомных молекул.	Электронные состояния в двухатомных молекулах. Молекулярные термы.	
2.4	Характеристики отдельных электронов и молекулярные оболочки.	Электронные оболочки и химическая связь в молекулах, состоящих из двух одинаковых атомов.	-
2.5	Колебания и вращения в молекулах.	Колебательно-вращательное движение в двухатомной молекуле. Вращательная структура электронно-колебательных полос.	-
2.6	Электронные переходы в молекулах.	Приближение Борна–Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона. Факторизация матричных элементов.	-
2.7	Спектры многоатомных молекул.	Нормальные колебания. Колебательные спектры многоатомных молекул.	
<b>3. Групповые консультации</b>			
3.1	Введение. Виды движения в молекуле.	Разделение энергии молекулы на части. Порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергий. Зависимость электронной энергии молекул от расстояния между ядрами.	-
3.2	Колебания двухатомных молекул.	Колебания двухатомной молекулы. Гармоничность и ангармоничность колебаний.	-
3.3	Классификация электронных состояний двухатомных молекул.	Классификация электронных состояний двухатомных молекул. Спектроскопические символы.	
3.4	Электронные состояния двухатомных молекул.	Электронные состояния в двухатомных молекулах. Молекулярные термы.	
3.5	Характеристики отдельных электронов и молекулярные оболочки.	Электронные оболочки и химическая связь в молекулах, состоящих из двух одинаковых атомов.	
3.6	Колебания и вращения в молекулах.	Колебательно-вращательное движение в двухатомной молекуле. Вращательная структура электронно-колебательных полос.	
3.7	Химическая связь в молекулах.	Ковалентная химическая связь, гибридизация.	
3.8	Электронные переходы в молекулах.	Приближение Борна–Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона.	
3.9	Спектры многоатомных молекул.	Нормальные колебания. Колебательные спектры многоатомных молекул.	

\* заполняется, если отдельные разделы дисциплины изучаются с помощью онлайн-курса. В колонке Примечание необходимо указать название онлайн-курса или ЭУМК. В других случаях в ячейки ставятся прочерки.

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)					
		Лекции	Практ.	Лаб.	ГК	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение.	2			2	4	8

	Виды движения в молекуле						
2	Колебания двухатомных молекул	4	4		2	4	14
3	Классификация электронных состояний двухатомных молекул	4	2		2	4	12
4	Электронные состояния двухатомных молекул	4	2		2	4	12
5	Характеристики отдельных электронов и молекулярные оболочки	4	2		2	4	12
6	Колебания и вращения в молекулах	6	4		2	4	16
7	Химическая связь в молекулах	4			2	4	10
8	Электронные переходы в молекулах	4	2		2	4	12
9	Спектры многоатомных молекул	4	2		2	4	12
	Итого:	36	18		18	36	108

#### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: указание наиболее сложных разделов, работа с конспектами лекций, презентационным материалом, рекомендации по выполнению курсовой работы, по организации самостоятельной работы по дисциплине и др.)

Необходимо строго следовать рекомендациям преподавателя по изучению материала. Систематически выполнять задания, предлагаемые преподавателем.

#### 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. — СПб: БХВ–Петербург, 2014. — 703 с.
2	<a href="#">Ельяшевич, М.А.</a> Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич ; предисл. Л. А. Грибова .— Изд. 4-е, стер. — М. : URSS : КомКнига, 2007. — 527 с. : ил. — Загл. корешка : Молекулярная спектроскопия .— Предм. указ.: с. 517-527 .— Библиогр.: с. 492-513.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Копытин, И.В. Квантовая теория: курс лекций / И.В. Копытин, А.С.Корнев, Н.Л.Манаков, М.В.Фролов – издательский дом ВГУ, 2023 – 261 с. <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m23-01.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m23-01.pdf</a>
4	Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров / И.И.Собельман. – Наука, 1977. – 319 с.
5	Гайтлер В. Квантовая теория излучения / В.Гайтлер. – М.: Изд-во иностр. лит., 1956. – 445 с.
6	Проблемы современной оптики и спектроскопии / под ред. Б.И. Степанова, А.А. Богуша. – Минск: Наука и техника, 1980. – 304 с.

7	<i>Веселов М.Г. Теория атома: строение электронных оболочек / М.Г.Веселов, Л.Н.Лабзовский. – М.: Наука, 1986. – 328 с.</i>
---	--

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)\*:

№ п/п	Ресурс
8	<i>Поисковая система e-library.ru</i>
9	<i>Поисковая система google.ru</i>
10	<i>Архив научных журналов <a href="http://arch.neicon.ru/">http://arch.neicon.ru/</a></i>
11	<i>Единое окно доступа к образовательным ресурсам. Библиотека <a href="http://window.edu.ru/">http://window.edu.ru/</a></i>
12	<i>Электронный каталог ЗНБ ВГУ <a href="https://www.lib.vsu.ru/">https://www.lib.vsu.ru/</a></i>
13	<i>Электронная библиотека Попечительского совета механико-математического факультета МГУ <a href="http://lib.mechmat.ru">lib.mechmat.ru</a></i>

\* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы, онлайн-курсы, ЭУМК

**16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы** (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1	<i>Оптические методы исследования вещества [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие к специальному лабораторному практикуму : [для проведения специального физ. практикума студентам 4 к. д/о физ. фак. каф. оптики и спектроскопии Воронеж. гос. ун-та] : [для специальности 010701 - Физика] / Воронеж. гос. ун-т ; [сост.: Т.В. Волошина и др.]. - Электрон. текстовые дан. - Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2010. // «Университетская библиотека online» : электронно-библиотечная система. – URL : <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m10-145.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m10-145.pdf</a></i>

**17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):**

**18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

Лекционная аудитория, доска, учебная литература, дисплейный класс.

**19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций**

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Разделы 1.1 – 1.9, 2.1 – 2.7, 3.1 – 3.9	ПК - 5	ПК – 5.1 ПК – 5.2 ПК – 5.3	Устный опрос Отчет о выполнении лабораторной работы
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				Список вопросов к зачету

**20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания**

## 20.1. Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме устного опроса.

Список вопросов для устного опроса:

1. Чем определяются характерные энергии для каждого типа движения в молекуле?
2. Каков порядок отношения электронной энергии к колебательной?
3. Каков порядок отношения колебательной энергии к вращательной?
4. Что означает запись  $X^1\Sigma_g$ ?
5. В чем отличие геометрии  $\sigma$ - и  $\pi$ -орбиталей?
6. Как параметризуются спектры ангармонических колебаний?
7. В чем отличие между R- и P-ветвями колебательно-вращательного спектра?
8. Общий вид волновой функции в приближении Борна–Оппенгеймера.
9. Сформулировать принцип Франка–Кондона.
10. Что такое фактор Франка–Кондона?
11. Общая структура колебательного спектра молекулы воды.
12. Общая структура колебательного спектра молекулы углекислого газа.

Описание технологии проведения.

Опрос проходит в письменной форме и состоит из трех вопросов. На ответ выделяются 15 минут.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Оценка «зачтено»: даны правильные и полные ответы на 2 или 3 вопроса.

Оценка «не зачтено»: даны правильные и полные ответы не более, чем на 1 вопрос.

## 20.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Список вопросов для проведения зачета  
(наименование оценочного средства промежуточной аттестации)

1. Виды движения в молекуле.
2. Колебания двухатомных молекул.
3. Классификация электронных состояний двухатомных молекул.
4. Электронные состояния двухатомных молекул.
5. Характеристики отдельных электронов и молекулярные оболочки.
6. Колебания и вращения в молекулах.
7. Химическая связь в молекулах.
8. Электронные переходы в молекулах.
9. Интенсивность переходов.
10. Нормальные колебания в трехатомных молекулах.

Описание технологии проведения

Зачет проходит в письменной форме. Студенту предлагается 10 вопросов из полного списка вопросов, на которые он должен дать краткий ответ в течение одного академического часа.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

«Зачтено»: даны правильные и полные ответы на 7 и более вопросов, допускаются погрешности, которые студент способен скорректировать под руководством преподавателя

«Не зачтено»: правильные и полные ответы даны на менее, чем 7 вопросов; ответы на вопросы содержат неточности и ошибки, которые студент не способен скорректировать под руководством преподавателя.