

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра фізичної оптики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан фізичного факультету



Руслан ВОВК

« 1 » *вересня* 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Молекулярна спектроскопія

Рівень вищої освіти	перший (бакалаврський)
Галузь знань	10 – природничі науки
Спеціальність	104 – фізика та астрономія
Освітня програма	фізика
Спеціалізація	
Вид дисципліни	за вибором
Факультет	фізичний

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою фізичного факультету.

Протокол від 30.08.2023 р. № 6.

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Макаровський Микола Олександрович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, доцент каф.
фізичної оптики

Маковецький Євген Дмитрович, канд. фіз.-мат. наук, доцент каф. фізичної оптики

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної оптики.

Протокол від 28.08.2023 р. № 1.

В. о. завідувача кафедри фізичної оптики



Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми «Фізика».

Гарант освітньо-професійної програми



 Олег ЛАЗОРЕНКО

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету.

Протокол від 29.08.2023 р. № 7.

Голова методичної комісії



 Микола МАКАРОВСЬКИЙ

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Молекулярна спектроскопія» складена відповідно до освітньої програми підготовки «бакалавр» зі спеціальності «104 – фізика та астрономія», освітньо-професійна програма «Фізика».

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни – оволодіти основоположними уявленнями про оптичні властивості молекулярних спектрів, про експериментальні дослідження таких спектрів та про фізичну природу тих оптичних властивостей, що можуть бути пояснені у рамках класичної квантової теорії.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни – вивчити матеріал щодо оптичних властивостей різноманітних спектрів молекул в рамках робочої програми даного курсу та додаткового матеріалу, який рекомендовано вивчити самостійно.

Компетентності, що забезпечуються дисципліною:

- Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується складністю та невизначеністю умов (ІК 1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК 2).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК 3).
- Здатність приймати обґрунтовані рішення (ЗК 5).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК 8).
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків (ЗК 9).
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 12).
- Здатність спілкуватися іноземною мовою (ЗК 13).
- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії (ФК 1).
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту (ФК 7).
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації (ФК 9).
- Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей (ФК 10).
- Усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних та астрономічних досліджень (ФК 12).
- Орієнтація на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук (ФК 13).
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК 14).

1.3. Кількість кредитів – 5.

1.4. Загальна кількість годин – 150.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
3-й	
Семестр	
6-й	
Лекції	
20 год.	
Практичні, семінарські заняття	
12 год.	
Лабораторні заняття	
не передбачено навчальним планом	
Самостійна робота	
118 год.	
в тому числі індивідуальні завдання	
курсова робота: 20 год.	

1.6. Заплановані результати навчання

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні положення теорії молекулярної спектроскопії, опис основних типів спектрів молекул, головні відомі експериментальні результати досліджень оптичних властивостей таких спектрів.

вміти: застосовувати здобуті знання для одержання, аналізу та пояснення експериментальних даних при дослідженнях оптичних властивостей спектрів молекул, визначати молекулу за її спектром.

Програмні результати навчання, що забезпечуються дисципліною:

- Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії (ПРН 1).
- Знати і розуміти фізичні основи астрономічних явищ: аналізувати, тлумачити, пояснювати і класифікувати будову та еволюцію астрономічних об'єктів Всесвіту (планет, зір, планетних систем, галактик тощо), а також основні фізичні процеси, які відбуваються в них (ПРН 2).
- Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій (ПРН 3).
- Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії (ПРН 5).
- Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії (ПРН 6).
- Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації (ПРН 7).

- Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань (ПРН 8).
- Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки (ПРН 11).
- Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень (ПРН 13).
- Знати і розуміти роль і місце фізики, астрономії та інших природничих наук у загальній системі знань про природу та суспільство, у розвитку техніки й технологій та у формуванні сучасного наукового світогляду (ПРН 17).
- Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства (ПРН 22).
- Розуміти історію та закономірності розвитку фізики та астрономії (ПРН 23).
- Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій (ПРН 24).
- Мати навички самостійного прийняття рішень стосовно своїх освітньої траєкторії та професійного розвитку (ПРН 25).

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Типи молекулярних спектрів та методи їх спостереження. Основи теорії обертальних, коливальних та електронних станів молекул

Тема 1. Вступ. Предмет та задачі молекулярної спектроскопії. Три види руху в молекулі та три типи молекулярних спектрів

Тема 2. Порівняння електронної, коливальної та обертальної енергій молекули. Комбінаційне розсіювання світла

Тема 3. Обертальні рівні та обертальні переходи. Обертальні спектри та методи їх спостереження

Тема 4. Коливання двохатомних молекул. Гармонійні коливання

Тема 5. Реальна потенційна крива. Правила відбору

Тема 6. Ангармонізм коливань. Перша та друга різниці

Тема 7. Коливальні спектри. Зближення коливальних рівнів

Розділ 2. Взаємодія видів руху у молекулі. Молекулярні терми. Суцільні спектри поглинання та випускання

Тема 1. Обертальна структура коливально-обертальних смуг

Тема 2. Класифікація електронних станів молекул. Молекулярні терми

Тема 3. Електронні спектри двохатомних молекул. Електронно-коливальні смуги

Тема 4. Схема Деландра. Серії Деландра

Тема 5. Принцип Франка-Кондона. Парабола Кондона

Тема 6. Взаємодія електронного та обертального рухів у молекулі. Діаграми Фортра

Тема 7. Суцільні спектри поглинання та випускання. Спектри багатоатомних молекул

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Типи молекулярних спектрів та методи їх спостереження. Основи теорії обертальних, коливальних та електронних станів молекул												
Тема 1	7	1				6						
Тема 2	11	1	1			9						
Тема 3	8	1	1			6						
Тема 4	8	1	1			6						
Тема 5	13	2	1			10						
Тема 6	9	2	1			6						
Тема 7	9	2	1			6						
Разом за розділом 1	65	10	6			49						
Розділ 2. Взаємодія видів руху у молекулі. Молекулярні терми. Суцільні спектри поглинання та випускання												
Тема 1	7	1				6						
Тема 2	11	1	1			9						
Тема 3	8	1	1			6						
Тема 4	8	1	1			6						
Тема 5	9	2	1			6						
Тема 6	13	2	1			10						
Тема 7	9	2	1			6						
Разом за розділом 2	65	10	6			49						
Індивідуальні завдання												
Курсова робота	20					20						
Усього годин	150	20	12			118						

4. Теми семінарських занять

№ з/п	Теми	Кільк. годин
1	Визначити фізичне розуміння та зробити порівняльне оцінювання електронної, коливальної та обертальної енергій молекули.	1
2	Порівняти енергію хаотичного руху молекули у просторі з обертальною енергією молекули; чи є вплив енергії хаотичного руху молекули на електронну, коливальну та обертальну енергії молекули.	1
3	Порівняти потенційну криву гармонійного осцилятора з реальною потенційною кривою та визначити фізичне розуміння суттєвої різниці між цими кривими.	2
4	Визначити першу та другу різниці щодо коливальних спектрів та пояснити фізичне розуміння цих величин.	2
5	Пояснити різницю між атомними та молекулярними термами; чи є в них спільні властивості?	1
6	Пояснити закономірності заповнення кліточок схеми Деландра; пояснити фізичне розуміння різниці між повздовжньою та поперечною серіями Деландра.	1

7	Визначити фізичне розуміння принципу Франка-Кондона; побудувати параболу Кондона.	2
8	Визначити умови утворення суцільних спектрів поглинання та випускання; пояснити фізичне розуміння цього явища.	2
	Разом	12

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Схожість та відмінність атомів та молекул. Чи діють квантові закони у молекулах?	6
2	Правило Стокса. Природа ліній супутників у спектрах комбінаційного розсіювання.	9
3	Обертання двохатомних молекул. Правила відбору для оберտальних переходів.	6
4	Квантовий осцилятор. Відмінність реальної потенційної кривої від параболі.	6
5	Чим відрізняються оберտальні спектри від коливальних?	10
6	Правила відбору для коливальних переходів.	6
7	Розподіл інтенсивностей при коливальних переходах.	6
8	Коливально-оберտальні спектри двохатомних молекул. Фізична природа полос у коливально-оберտальних спектрах.	6
9	Коливально-оберտальні переходи. Правила відбору.	9
10	Електронні стани молекул. Електронні переходи у двохатомних молекулах.	6
11	Фізична природа електронно-коливальних смуг.	6
12	Як виникають серії Деландра? В чому полягають їх особливості?	6
13	Розподіл інтенсивностей при переходах згідно з принципом Франка-Кондона.	10
14	Збурення та предисоціація у спектрах двохатомних молекул. Характеристичні спектри у спектрах багатоатомних молекул.	6
15	Індивідуальне завдання (курсова робота)	20
	Разом	118

6. Індивідуальні завдання

№ з/п	Теми курсових робіт
1	Фізика двохатомних молекул. Квантові властивості.
2	Типи молекулярних спектрів та методи їх спостереження.
3	Фізика відмінностей спектрів молекул від спектрів атомів.
4	Три види руху та три види енергій молекули. Порівняння цих енергій.
5	Комбінаційне розсіювання світла як метод спостереження спектрів молекул.
6	Оберտальні спектри та методи їх спостереження.
7	Реальна потенційна крива. Коливальні спектри.
8	Взаємодія видів руху у молекулі. Повна енергія молекули.
9	Оберտальна структура коливально-оберտальних смуг.
10	Молекулярні терми. Класифікація електронних станів.
11	Електронні спектри двохатомних молекул. Електронно-коливальні смуги.

12	Схема Деландра. Серії Деландра.
13	Принцип Франка-Кондона. Парабола Кондона.
14	Взаємодія електронного та обертового рухів у молекулі.
15	Діаграми Фортра.
16	Спектри багатоатомних молекул.

7. Методи навчання

1. Проведення лекційних занять
2. Проведення семінарських занять
3. Самостійна робота студентів з вивчення додаткових матеріалів з курсу

8. Методи контролю

1. Поточний контроль при проведенні семінарських занять
2. Індивідуальне завдання: курсова робота
3. Екзамен

9. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання		Індивідуальне завдання (курсова робота)	Разом	Екзамен	Сума
Розділ 1	Розділ 2				
18	18	24	60	40	100

Досягнення студентів з навчальної дисципліни «Молекулярна спектроскопія» оцінюються в балах, загальна сума яких становить 100. Вона складається з 60 балів, які студент може отримати протягом семестру, та 40 балів, які може отримати при проходженні підсумкового контролю у вигляді екзамену.

60 балів протягом семестру – це 36 балів, що нараховуються при проведенні семінарських занять, та 24 бали за курсову роботу.

Передбачається по 3 бали за кожну з 12 годин семінарських занять, по 6 в обох розділах курсу. Бали нараховуються студентам за успішне виконання поставлених завдань: або це правильні відповіді на усні запитання, поставлені викладачем за темою даного семінарського заняття чи попередніх лекцій, або це розв'язання поставленої задачі.

Курсова робота є індивідуальним завданням, яке студент виконує на протязі семестру і надає для оцінювання перед екзаменом. Курсові роботи оцінюються за шкалою 0–24 балів виходячи з їх відповідності завданням і повноти виконання.

Екзамен проводиться у письмовому вигляді шляхом написання студентами відповідей на запитання екзаменаційного білету. Кожен білет містить два запитання. Відповідь на перше запитання оцінюється за шкалою 0–15 балів, відповідь на друге – за шкалою 0–25 балів. Тобто максимальною оцінкою за екзаменаційну роботу є 40 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90–100	відмінно	зараховано
70–89	добре	
50–69	задовільно	
1–49	незадовільно	не зараховано

10. Рекомендована література

Основна література

1. Sugumar R. W. Molecular and Atomic Spectroscopy. – Repro Books Limited, 2021. – 296 p.
2. Кучерук І. М., Горбачук І. Т. Загальний курс фізики. Том 3. Оптика. Квантова фізика. – К.: Вища школа, 1999. – 517 с.

Допоміжна література

1. Стадник В. Й. Оптика: навч. посібн. – Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2008. – 360 с.