

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ  
Декан химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Структура и динамика молекулярных систем**

**Уровень высшего образования:**  
Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Лазерная химия

**Форма обучения:**  
очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>СПК-2.С.</b> Способен применять знание основных теоретических принципов методов лазерной спектроскопии и диагностики в практической деятельности	<b>СПК-2.С.1</b> грамотно использует методы лазерной спектроскопии и диагностики при изучении химических объектов	<b>Знать:</b> физические и математические модели, используемые в молекулярной спектроскопии, их возможности и ограничения <b>Уметь:</b> интерпретировать спектроскопические данные о физико-химических процессах, полученных методами лазерной спектроскопии
<b>СПК-5.С.</b> Способен проводить квантовохимические и термодинамические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	<b>СПК-5.С.2</b> Проводит расчеты с использованием современных программных продуктов и баз данных	<b>Уметь:</b> использовать программные продукты для выполнения квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул <b>Владеть:</b> навыками квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул с использованием существующих программные продукты и баз спектральных данных <b>Владеть:</b> навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для расчета термодинамических функций атомов и молекул

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

*Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 68 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (28 часов – занятия лекционного типа, 28 часов – занятия семинарского типа, 8 часов – индивидуальные консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 40 часов составляет самостоятельная работа студента.*

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен освоить дисциплины «Физическая химия», «Квантовая химия», «Строение молекул», «Математический анализ», «Колебания и волны. Оптика», «Уравнения математической физики».

**Знать:** типы линейных дифференциальных уравнений II порядка и методы их решения; основные явления, связанные с колебательными и волновыми процессами в оптических системах; основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах и способы аналитического представления этих закономерностей; основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений.

**Уметь:** пользоваться информационными базами данных для решения задач профессиональной деятельности; применять полученные знания фундаментальных разделов математики для анализа основных задач, типичных для естественнонаучных дисциплин;

**Владеть:** навыками использования базовых физических знаний при решении химических задач; простейшими расчетными методами решения физико-химических задач; навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных).

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема №1. Энергетические и структурные параметры молекул и их ионов	10	4	4		1		9	1		1

Тема №2. Приближенное разделение видов движения и внутримолекулярные взаимодействия.	10	4	4		1		9	1		1
Тема №3. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Молекулярные ридберговские состояния.	11	4	4		2		10	1		1
Тема №4. Многоатомные молекулы типа симметричного и ассиметричного волчка. Строение и спектры «нежестких» молекул.	10	4	4		1		9	1		1
Тема №5. Электрические и магнитные свойства молекул. Эффект Штарка и Зеемана в молекулярных спектрах.	10	4	4		1		9	1		1
Тема №6. Методы квантовой химии. Градиентные методы и молекулярные свойства.	10	4	4		1		9	1		1
Тема №7. Динамика возбужденных состояний. Радиационные и нерадиационные времена жизни состояний.	11	4	4		1		9	2		2
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36					4	4	32		32
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>28</b>	<b>28</b>		<b>8</b>	<b>4</b>	<b>68</b>	<b>40</b>		<b>40</b>

## 6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

1. База данных HITRAN по абсорбционным переходам молекул (<http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>)
2. Спектроскопическая база данных GEISA по излучению в атмосфере (<http://ara.abct.lmd.polytechnique.fr/index.php?page=geisa-2> )
3. База данных NIST по колебательным и электронным уровням энергии молекул (<http://webbook.nist.gov/chemistry/es-ser.html> )
4. Базы данных VAMDC ([http://portal.vamdc.org/vamdc\\_portal/nodes.seam](http://portal.vamdc.org/vamdc_portal/nodes.seam) )

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

#### Основная литература

1. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. - М.: Физматлит, 2016.
2. Г. Герцберг, Спектры и строение многоатомных молекул / пер. с англ. М.Н. Флеровой. - М.: Мир, 1969.
3. Таунс, А. Шавлов, Радиоспектроскопия / пер. с англ. В. Г. Веселаго. – М.: Изд. иностранной литературы, 1959.
4. П. Эткинс, Физическая химия. В 2-х томах. – М.: Мир, 1980.
5. H. Lefebvre-Brion, R. W. Field. The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules. New York.: Academic Press, 2004

#### Дополнительная литература

1. J. Brown, A. Carrington, Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules, Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
2. J. Tennyson, Astronomical Spectroscopy: An Introduction To The Atomic And Molecular Physics Of Astronomical Spectroscopy, London : Imperial College Press, 2010.

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

#### 9. Язык преподавания – русский

**10. Преподаватели:**

10.1. д.ф.-м.н., заведующий кафедрой, Столяров Андрей Владиславович, кафедра лазерной химии химического факультета МГУ

10.2. д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, Зайцевский Андрей Вениаминович, кафедра лазерной химии химического факультета МГУ

10.3. к.х.н, доцент, Попов Андрей Михайлович, кафедра лазерной химии химического факультета МГУ

**Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

**Контрольные вопросы к коллоквиуму**

Назовите основные энергетические и структурные параметры молекул и их ионов. Какие существуют типы потенциалов взаимодействия атомов и молекул на далеких расстояниях?

Опишите случаи связи по Хунду. Что такое «хорошие» и «плохие» квантовые числа?

В чем суть адиабатического и диабатического представлений?

Какие существуют методы учета неадиабатических взаимодействий? Назовите их.

В чем суть принципа Франко-Кондона? Перечислите правила отбора для вращательных, колебательно-вращательных и электронно-колебательно-вращательных переходов.

Приведите примеры наблюдаемых в спектрах запрещенных синглет-триплетных переходов.

Для каких состояний появляется эффект Л-удвоения?

В чем состоят особенности строения и спектров молекул  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$ ?

Приведите примеры молекул, для которых будут проявляться линейный и квадратичный эффекты Штарка.

В чем отличие нормального и аномального эффектов Зеемана?

Каковы механизмы фотоионизации и автоионизации молекул?

Какие существуют спектральные методы измерения температуры?

**Перечень вопросов к экзамену:**

1. Энергетические и структурные параметры молекул и их ионов. Потенциалы взаимодействия атомов и молекул на далеких расстояниях. Приближение изолированной частицы. Влияние внешней среды. Межмолекулярные взаимодействия и внешнее электромагнитное поле.

2. Приближенное разделение видов движения и внутримолекулярные взаимодействия. Тонкая структура спектров. Релятивистские эффекты. Случаи связи по Хунду. Строгие и приближенные правила отбора. «Хорошие» и «плохие» квантовые числа. Адиабатическое и диабатическое представление. Методы учета неадиабатических взаимодействий.

3. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Вращательные и колебательно-вращательные спектры. Эффект ангармоничности и центробежного искажения. Изотопический эффект. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона. Линейчатые и континуальные спектры. Интенсивности линий и правила отбора. Особенности спектров свободных радикалов OH, CN, CO, NO и CH.
4. Молекулярные ридберговские состояния. Взаимное проникновение орбит. Вращательная, колебательная и спин-орбитальная автоионизация. Эффект  $\Lambda$ -удвоения. Многоканальная теория квантового дефекта. Аналог теоремы Гельмана-Фейнмана для ридберговских состояний. Модель поляризационного потенциала остова.
5. Многоатомные молекулы типа симметричного и ассиметричного волчка. Равновесная геометрия. Свойства симметрии и интенсивности переходов. Эффект ангармоничности. Центробежное возмущение. Колебательно-вращательное взаимодействие и  $l$ -удвоение. Дипольный момент, вызванный вырожденными колебаниями. Взаимодействие между колебательными состояниями (резонанс Ферми).
6. Электронно-колебательно разрешенные переходы. Запрещенные синглет-триплетные переходы. Особенности строения и спектров молекул  $H_3^+$ ,  $H_2O$  и  $CO_2$ . Обзор спектральных баз данных по расчету синтетического спектра астрофизически важных молекул (HITRAN, GEISA, NIST).
7. Строение и спектры «нежестких» молекул. Колебания большой амплитуды, внутреннее вращение и инверсионные переходы. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Тонкая структура инверсионных спектров, обусловленная колебательно-вращательным взаимодействием. Внутреннее заторможенное вращение в молекулах типа симметричного волчка. Высота потенциальных барьеров. Правила отбора.
8. Электрические и магнитные свойства молекул. Дипольные и квадрупольные моменты молекул. Статическая поляризуемость. Измерение дипольных моментов. Магнитные моменты (факторы Ланде) и магнитная восприимчивость молекул, методы измерений. Магнитное экранирование ядер.
9. Эффект Штарка и Зеемана в молекулярных спектрах. Нормальный и аномальный эффект Зеемана. Относительная интенсивность магнитных компонент и идентификация переходов по картине их расщепления. Запрещенные переходы. Изменение интенсивности, обусловленное эффектом Штарка. Эффект Зеемана в слабых полях для молекул, имеющих отличный от нуля электронный момент количества движения. Комбинированный эффект Штарка-Зеемана.
10. Методы квантовой химии. Электронная структура и поверхность потенциальной энергии. Атомные базисные наборы. Учет электронной корреляции и релятивистских эффектов. Конфигурационные взаимодействия. Много частичная теория возмущений. Функционал плотности.
11. Градиентные методы и молекулярные свойства. Расчет равновесной структуры и переходного состояния (оптимизация геометрии). Расчет перманентных дипольных моментов и статической поляризуемости методом конечного поля. Возбужденные состояния. Электронные матричные элементы. Обзор пакетов программ для расчета электронной структуры (GAUSSIAN, MOLPRO, GAMESS, DALTON, MOLCAS).
12. Динамика возбужденных состояний. Механизмы фотоионизации и автоионизации. Оценки скоростей нерадиационного распада. Золотое правило Ферми. Радиационные и нерадиационные времена жизни состояний. Коэффициенты ветвления и кинетика самопроизвольного распада. Фотохимические и цепные реакции.



### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
Знать: физические и математические модели, используемые в молекулярной спектроскопии, их возможности и ограничения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене
Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: интерпретировать спектроскопические данные о физико-химических процессах, полученных методами лазерной спектроскопии Уметь: использовать программные продукты для выполнения квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств атомов и молекул	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене
Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения. Владеть: навыками квантовохимических и термодинамических расчетов основных свойств	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос при сдаче задачи и на экзамене

атомов и молекул с использованием существующих программные продукты и баз спектральных данных	
-----------------------------------------------------------------------------------------------	--

Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для расчета термодинамических функций атомов и молекул Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для расчета термодинамических функций атомов и молекул	
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--