

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Институт прикладной математики и компьютерных наук

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор



А.В. Замятин

«16» мая 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

**Основы молекулярной спектроскопии**

по направлению подготовки

**01.04.02 Прикладная математика и информатика**

Направленность (профиль) подготовки :  
**Интеллектуальный анализ больших данных**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Магистр**

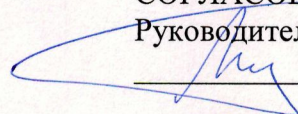
Год приема

**2022**


Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.02.03

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 А.В. Замятин

Председатель УМК

 С.П. Сущенко

Томск – 2022

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-4 – способность использовать специализированные знания из разделов химии, биологии для проведения исследований в области биоинформатики, биомедицины и смежных дисциплин.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-4.3 Владеет основными биоинформатическими средствами анализа геномной, структурной и иной биологической информации.

ИПК-4.2 Находит и использует информацию, накопленную в базах данных по структуре геномов, белков и другой биологической информации.

ИПК-4.1 Применяет методы биологии и биоинформатики для получения новых знаний.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Дать студентам сведения по некоторым теоретическим проблемам, интенсивно исследующимся в последние годы, в области физики атомов и молекул.

## **3. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль «Биоинформатика и биомедицина».

## **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Второй семестр, зачет с оценкой

## **5. Входные требования для освоения дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины студенты должны иметь базовые знания из курса общей физики, квантовой механики, курсов математических дисциплин, включая математический анализ, курс дифференциального и интегрального исчисления, линейную алгебру.

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-лабораторные: 24 ч.

в том числе практическая подготовка: 0 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## **8. Содержание дисциплины, структурированное по темам**

### **Раздел 1. Введение в спектроскопию**

Введение. Молекула, как объект квантовой механики. Природа и классификация спектров. Параметры спектральных линий. Гамильтониан ансамбля частиц при наличии внешних полей. Свободная молекула. Переход от классического колебательно-вращательного гамильтониана нормальной многоатомной молекулы к квантовому гамильтониану.

### **Раздел 2. Основы атомной спектроскопии**

Введение. Краткий исторический обзор. Приближение центрального поля. Атом водорода. Гамильтониан многоэлектронного атома. Систематика спектров многоэлектронных атомов. Типы связи моментов и классификация уровней в атоме. Многоэлектронные атомные функции. Генеалогическая схема. Генеалогические коэффициенты. Мультиплетная структура термов.

### **Раздел 3. Вращательные спектры молекул**

Вращательный спектр многоатомной молекулы в приближении жесткого волчка. Молекулы типа сферического волчка, симметричного волчка, асимметричного волчка. Анализ энергетического спектра молекул различного типа в приближении жесткого волчка.

### **Раздел 4. Колебательные спектры молекул**

Многоатомная молекула в приближении гармонического приближения. Невырожденный, дважды и трижды вырожденный осциллятор. Анализ колебаний молекул различного типа в гармоническом приближении.

### **Раздел 5. Спектроскопия двухатомных молекул**

Спектроскопия двухатомных молекул. Особенности гамильтониана двухатомной молекулы. Спектры реальных двухатомных молекул. Влияние ангармонизма, колебательно-вращательных взаимодействий и центробежных эффектов на спектры реальных молекул. Извлечение физической информации из колебательно-вращательных спектров. Интерпретация спектров. Обратная спектроскопическая задача. Метод наименьших квадратов. Определение равновесного межъядерного расстояния и потенциальной функции реальной молекулы.

### **Раздел 6. Спектроскопия многоатомных молекул**

Спектроскопия многоатомных молекул. Анализ особенностей колебательного спектра (собственных значений гамильтониана) в ангармоническом приближении. Центробежные эффекты. Собственные значения колебательно-вращательного гамильтониана многоатомной молекулы типа сферического волчка с учетом ангармонизма, колебательно-вращательных взаимодействий и СРС ЛЗ центробежных эффектов. Интенсивности колебательно-вращательных переходов.

## **9. Текущий контроль по дисциплине**

Текущий контроль освоения дисциплины осуществляется в виде проведения регулярного экспресс-тестирования по пройденному материалу и проверки знаний при допуске к выполнению лабораторных работ.

## **10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации**

Промежуточная аттестация проводится в виде сдачи отчетов по лабораторным занятиям. Завершающая аттестация по курсу проводится в форме зачета с оценкой.

Типовые задания для проведения промежуточной аттестации по дисциплине

1. Переход от декартовых координат к внутренним (без учета вращения), замена переменных. Единицы измерения для кинетической и потенциальной энергии.
2. Колебания многоатомных молекул, виды движения в молекуле.
3. Вращение жесткого волчка, вращательные уровни.
4. Качественный анализ спектров сложных молекул.
5. Ядерные статистические веса и статистические суммы.

6. Вариационный метод решения стационарного уравнения Шредингера.
7. Колебательно-вращательный Гамильтониан в нормальных координатах.
8. Нормальные координаты, переход от смещений к нормальным координатам.
9. Ортогональные координаты (координаты Радо). Внутренние координаты и задание геометрии в квантовой химии.
10. Интенсивность линий поглощения, дипольный момент.
11. Условия Эккарта, кинетическая энергия в линеаризованных координатах (G матрица).
12. 6C, 9C, 12C символы, вычисление матричных элементов оператора дипольного момента.
13. Оператор кинетической энергии во внутренних полярных координатах.
14. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
15. Методы решения уравнения Шредингера.
16. Колебания многоатомных молекул, виды движения в молекуле.
17. Получение Гамильтониана Уотсона: получение уравнения

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + \dots, \text{ где}$$

$$\begin{bmatrix} J_x & I_x & I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ J_y & I_y & I_{xy} & I_{yy} & I_{yz} \\ J_z & I_z & I_{xz} & I_{yz} & I_{zz} \end{bmatrix}$$

18. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
19. Особенности различных типов молекул: Линейные молекулы, Симметричные волчки, Сферические волчки, Асимметричные волчки.
20. Симметризованные координаты.
21. Вращение жесткого волчка, получение матричных элементов.

### 11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Алиев М.Р., Папоушек Д. Колебательно вращательные спектры молекул. – Прага, 1982.
- Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия. – М., ГИФМЛ, 1962.
- Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно- вращательной спектроскопии молекул. Части 1 и 2. – Изд - во ТГУ. Томск., 1990.

б) дополнительная литература:

- Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. – М: Наука, 1977.
- Веселов М.Г., Лабзовский Л.Н. Теория атомов. Строение электронных оболочек. – М: Наука, 1986.
- Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории атомов и ионов. – М: Наука, 1983.
- Рудзикас З.Б., Никитин А.А., Холтыгин А.Ф. Теоретическая атомная спектроскопия (руководство для астрономов и физиков). – Л.:ЛГУ, 1990.
- Джадд Б., Вайборн. Теория сложных атомных спектров. – М.:Мир, 1973.
- Фриш С.З. Оптические спектры атомов. – М.:ГИФМЛ, 1963.

## 13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Презентации с использованием пакетов MS Office и OpenOffice; специализированное программное обеспечение для автоматизации эксперимента и анализа полученных данных; библиографические базы данных SCOPUS и ISI Web of Science; Поисковая система Google Scholar.

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)
- Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)
- Библиографическая база данных Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)
- Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)
- Электронная база атомных данных NIST: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/>

## 14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Все виды материально-информационной базы Научной библиотеки ТГУ, мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ, специализированное лабораторное оборудование кафедры оптики и спектроскопии ТГУ и Центров коллективного пользования ТГУ.

## 15. Информация о разработчиках

Карловец Екатерина Владимировна, PhD, доцент кафедры оптики и спектроскопии ТГУ.

Черепанов Виктор Николаевич, д-р. физ.-мат. наук, доцент, зав. кафедрой оптики и спектроскопии.

Никитин Андрей Владимирович, д-р. физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры оптики и спектроскопии.