

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

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан физического факультета



С.Н. Филимонов

«15» апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины

**Теория атомных спектров**

по направлению подготовки

**03.03.02 Физика**

Направленность (профиль) подготовки:

**«Фундаментальная физика»**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Бакалавр**

Год приема

**2021**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.02.08

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП



О.Н. Чайковская

Председатель УМК



О.М. Сюсина

Томск – 2021

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-2 – Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;

– ПК-1 – Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

– ИОПК-2.2. – Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования;

– ИПК-1.1. Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить математический аппарат теории атома применительно к задачам атомной спектроскопии.

– Научиться применять теорию атома к построению и анализу моделей атомных систем и явлений, выработать навыки решения практических задач профессиональной деятельности.

## **3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в модуль по выбору "Оптика и спектроскопия".

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

Семестр 7, экзамен

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

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для изучения и понимания материала данной дисциплины обучающийся должен владеть основными представлениями и понятиями из курсов, входящих в модули: «Высшая математика», «Общая физика», «Общий физический практикум».

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины (модуля)**

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

– лекции: 32 ч.;

– практические занятия: 32 ч.;

– в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## 8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

### Часть I. Спектры атомов

Введение. Краткий исторический обзор.

Раздел 1. *Приближение центрального поля. Гамильтониан многоэлектронного атома.*

Раздел 2. *Движение электрона в одновалентных атомах.*

Атом водорода. Тонкая структура. Щелочные металлы.

Раздел 3. *Интерпретация электронных взаимодействий как взаимодействий угловых моментов.*

Раздел 4. *Систематика спектров многоэлектронных атомов*

Типы связи моментов и классификация уровней в атоме. Однородные типы связи LS и jj. Эмпирические правила Гунда, Ланде, Лапорте. Промежуточные типы связи: LK, j1, Jj, jK. Термы конфигураций, состоящих из эквивалентных электронов. Термы смешанных конфигураций.

Раздел 5. *Спектры многоэлектронных атомов. Рентгеновские спектры*

Спектры щелочных металлов. Спектры щелочно-земельных металлов и He. Основные характеристики спектров атомов с заполняющимися p-оболочками. Спектры атомов с дстраивающимися d- и f- оболочками.

### Часть II. Теория атомных спектров

Раздел 6. *Теория углового момента.*

Оператор углового момента. Матрица поворота системы координат. Оператор поворота. Функции Вигнера. Сложение двух угловых моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана,  $3j$  - символы Вигнера. Сложение трех угловых моментов.  $6j$  - символы Вигнера. Сложение четырех и более угловых моментов.  $9j$  - и  $3nj$  - символы Вигнера. Неприводимые тензорные операторы. Теорема Вигнера-Эккарта. Вычисление приведенных матричных элементов оператора углового момента  $j$ , скалярного оператора, сферической функции. Тензорное произведение неприводимых тензорных операторов. Скалярное произведение тензорных операторов. Связь векторного произведения векторов с тензорным произведением ранга 1. Прямое произведение неприводимых тензорных операторов. Матричные элементы тензорных произведений неприводимых тензорных операторов. Тензоры действуют на одни переменные. Скалярное произведение. Тензоры действуют на разные переменные. Матричные элементы прямого произведения неприводимых операторов.

Раздел 7. *Построение многоэлектронных функций.*

Система невзаимодействующих N электронов. Волновые функции двух электронов в случае LS - и jj - связей. Волновая функция оболочки из N неэквивалентных взаимодействующих электронов. Генеалогическая схема. Волновая функция оболочки из N эквивалентных электронов. Генеалогические коэффициенты. Система уравнений для генеалогических коэффициентов. Волновая функция полностью заполненной оболочки. Квантовое число старшинства. Квасиспин. Особенности классификации состояний fN оболочки.

Раздел 8. *Энергия уровней многоэлектронных атомов.*

Общая постановка задачи. Выражение оператора энергии через неприводимые тензорные операторы. Одноэлектронные операторы. Двухэлектронные операторы. Энергия термов полностью заполненных оболочек. Термы неэквивалентных электронов в незаполненных оболочках. Энергия термов незаполненной lN оболочки из эквивалентных электронов.

Раздел 9. *Мультиплетная структура термов. Сверхтонкая структура термов.*

Общее выражение для матричного элемента оператора спин-орбитального взаимодействия. Спин-орбитальное взаимодействие для одного электрона вне заполненной оболочки. Спин-орбитальное взаимодействие в конфигурации lN. Спин-орбитальное взаимодействие в конфигурации lNl'.

Раздел 10. *Теория электронных переходов.*

Введение. Мультипольные моменты радиационных переходов. Электрические дипольный, квадрупольный и магнитный дипольный моменты. Интенсивность мультипольных переходов. Правила отбора для электронных мультипольных переходов. Точные правила отбора. Приближенные правила отбора для LS - связи. Правила отбора для электрических дипольных, квадрупольных и магнитных дипольных переходов. Сила линии и мультиплета. Принцип спектроскопической устойчивости. Правила сумм для относительных сил линий. Сила осциллятора. Правило сумм для сил осциллятора.

Раздел 10. *Атом во внешнем поле.*

Атом в электрическом поле: квадратичный и линейный эффекты Штарка. Атом в магнитном поле: эффекты Зеемана в слабых полях и Пашена-Бака в сильных полях. Относительные интенсивности зеемановских и штарковских спектральных линий.

Раздел 12. *Статистические модели в теории атома.*

Модель Ферми-Томаса. Приближение Хартри-Фока и его модификации.

### **Часть III. Элементы теории излучения**

Раздел 13. *Основные сведения из теории электромагнитного поля.* Основные эмпирические законы электромагнитного поля. Система уравнений Максвелла-Лоренца. Учет атомной структуры вещества

Раздел 14. *Моды электромагнитного поля.*

Понятие мод поля. Плотность мод поля в полости. Потенциалы электромагнитного поля. Моды поля как квантовомеханические осцилляторы. Квантовомеханическое описание поля.

Раздел 15. *Гамильтониан взаимодействия излучения с веществом .*

Раздел 16. *Элементарные излучательные процессы.*

Феноменологическая теория Эйнштейна. Кинетические уравнения для населенностей, их анализ. Квантовая теория коэффициентов Эйнштейна.

Раздел 17. *Теория теплового излучения.*

Раздел 18. *Поляризация среды в электромагнитном поле.*

Полная плотность тока и поляризация среды. Средняя плотность тока. Формальные решения уравнения матрицы плотности. Уравнение матрицы плотности подсистемы в термостате .

Раздел 19. *Восприимчивость и проводимость среды .*

Классическая теория восприимчивости.

Квантовая теория линейной восприимчивости.

Квантовая теория нелинейной квадратичной и кубичной восприимчивостей.

Ориентационная поляризация среды. Диамагнитная восприимчивость .

Раздел 20. *Элементы теории уширения и сдвигов спектральных линий.*

Классическая модель уширения столкновением.

Квантовомеханическая теория уширения столкновением. Модели Андерсена-Тсао-Курнютта, Робера-Бонами., приближение точных траекторий.

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

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения контрольных работ, заданий и тестов по материалам курсу, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом): посещаемость – максимальный балл 10, активность на занятиях – 10, выполнение контрольных заданий – 40. Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр.

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

Экзамен в 7 семестре проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

На промежуточную аттестацию планируется не более 40% рейтинга.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Экзаменационная оценка определяется исходя из результатов экзамена и текущей аттестации в течение семестра и согласуется с принятым соответствием с 5-ти балльной шкалой оценивания: 99-86 — «отлично»; 85-66 — «хорошо»; 65-45 — «удовлетворительно», менее 45 — «неудовлетворительно».

Экзаменационный билет состоит из двух частей.

Первая часть включает в себя 2 основных вопроса, проверяющих сформированность компетенций ОПК-2, ПК-1 в соответствии с индикаторами ИОПК-2.2, ИПК 1.1.

Ответы даются в развернутой форме.

Вторая часть содержит 1-2 дополнительных вопросов по курсу, проверяющих соответствие индикатору достижения компетенции ИПК-1.1. Ответ на вопрос второй части дается в краткой форме, включающей краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов.

1. Приближение центрального поля.
2. Оператор поворота. Функции Вигнера и их основные свойства.
3. Общие правила отбора для мультипольных моментов: точные и приближенные для LS - связи.
4. Спектры щелочных металлов.
5. Неприводимые тензорные операторы.
6. Энергия термов неэквивалентных электронов.
7. Спектры щелочно-земельных металлов и *He*.
8. Сложение трех угловых моментов.  $6j$  - символы.
9. Волновая функция оболочки из  $N$  неэквивалентных взаимодействующих электронов. Генеалогическая схема.
10. Основные характеристики спектров атомов с заполняющимися  $p$ -оболочками.
11. Вычисление приведенного матричного элемента оператора углового момента  $J$ .
12. Сила линии и мультиплета. Правило сумм для относительных сил линий.
13. Интерпретация электронных взаимодействий как взаимодействий угловых моментов.
14. Квадратичный эффект Штарка.
15. Спин-орбитальное взаимодействие для одного электрона вне заполненной оболочки.
16. Волновые функции двух электронов в случае LS - и  $jj$  - связей.
17. Теорема Вигнера-Экарта.
18. Спин-орбитальное взаимодействие в конфигурации  $l^N$ .
19. Квантовое число старшинства.
20. Тензорное произведение неприводимых тензорных операторов.
21. Сила осциллятора. Правило сумм для сил осцилляторов.
22. Выразить одноэлектронные операторы энергии атома через неприводимые тензорные операторы.
23. Сложение четырех и более угловых моментов.  $9j$  - и  $3nj$  - символы Вигнера.
24. Нормальный эффект Зеемана в слабых магнитных полях.
25. Движение электрона в одновалентных атомах: щелочные металлы.
26. Сложение двух угловых моментов. Коэффициенты Клебша-Гордона.
27. Спин-орбитальное взаимодействие в конфигурации  $l^N l'$ .
28. Типы связей и классификация уровней в атоме.
29. Матричные элементы тензорных произведений неприводимых тензорных операторов: тензоры действуют на одни переменные.
30. Эффект Зеемана (Пашена-Бака) в сильных магнитных полях.
31. Эмпирические правила Гунда, Ланде, Лапорте.

32. Волновая функция оболочки из  $N$  эквивалентных взаимодействующих электронов. Генеалогические коэффициенты.
33. Общее выражение для матричного элемента оператора спин-орбитального взаимодействия.
34. Система уравнений для генеалогических коэффициентов ( на примере оболочки  $I^3$ ).
35. Спектры атомов с достраиваемыми  $d$  - и  $f$  - оболочками. Особенности классификации состояний  $f^N$  оболочки.
36. Матричные элементы тензорных произведений неприводимых тензорных операторов: тензоры действуют на разные переменные.
37. Рентгеновские спектры.
38. Движение электрона в одновалентных атомах: атом водорода. Тонкая структура.
39. Дипольный момент и правила отбора для электродипольного излучения.
40. Квадрупольный момент и правила отбора для квадрупольного излучения.
41. Оператор углового момента. Его основные свойства.
42. Выразить двухэлектронные операторы энергии атома через неприводимые тензорные операторы.
43. Магнитно-дипольный момент и правила отбора для магнитно-дипольного излучения .
44. Показать связь тензорного произведения неприводимых тензорных операторов с векторным произведениями векторов.
45. Энергия термов полностью заполненных оболочек.
46. Интенсивность мультипольных переходов.
47. Определение термов конфигураций из эквивалентных электронов.
48. Волновая функция полностью заполненной оболочки.
49. Линейный эффект Штарка.
50. Гамильтониан многоэлектронного атома.
51. Квазиспин.
52. Принцип спектроскопической устойчивости.
53. Прямое произведение неприводимых тензорных операторов. Матричные элементы прямого произведения неприводимых тензорных операторов.
54. Аномальный эффект Зеемана в слабых магнитных полях.
55. Эмпирические законы электромагнитного поля
56. Дифференциальная и интегральная формы уравнений Максвелла.
57. Учет атомной структуры вещества. Уравнения Максвелла-Лоренца.
58. Понятие мод поля. Плотность мод поля в полости.
59. Моды электромагнитного поля как гармонические осцилляторы.
60. Квантовомеханическое описание электромагнитного поля.
61. Гамильтониан взаимодействия частиц с электромагнитным полем.
62. Феноменологическая теория Эйнштейна. Кинетическое уравнение.
63. Квантовая теория коэффициентов Эйнштейна.
64. Общий вид уравнения переноса излучения.
65. Частные формы уравнения переноса излучения.
66. Предельные случаи решений уравнения переноса излучения: оптически тонкие среды и большие оптические толщи.
67. Теория теплового излучения: законы Планка, Вина, Рэлея-Джинса, Стефана-Больцмана, смещения Вина.
68. Полная плотность тока и поляризация среды. Средняя плотность тока.
69. Уравнение матрицы плотности подсистемы в термостате.
70. Общее определение восприимчивости и проводимости среды.
71. Классическая теория восприимчивости.
72. Квантовая теория восприимчивости: линейная восприимчивость.
73. Квантовая теория восприимчивости: квадратичная нелинейная восприимчивость.
74. Квантовая теория восприимчивости: кубичная нелинейная восприимчивость.
75. Ориентационная поляризация среды.

76. Диаманитная восприимчивость.
77. Классическая модель уширения столкновением.
78. Квантовомеханическая теория уширения столкновением.
79. Ударное приближение в теории уширения столкновением. Приближения Андерсена-Тсао-Курньюта, Робера-Бонами, приближение точных траекторий.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22002>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

### Примерная тематика проверочных заданий к лекциям.

#### Вариант №1

1. Построить электронную конфигурацию атомов в основном электронном состоянии.
2. Построить электронную конфигурацию атомов в возбужденном электронном состоянии.

#### Вариант №2

1. Найти наиболее глубокие термы атомов в случае одной незаполненной оболочки (в приближении связи LS)
2. Найти наиболее глубокие термы атомов в случае нескольких незаполненных оболочек (в приближении связи LS).

#### Вариант №3

1. Найти термы атомов в случае неэквивалентных электронов (для LS и jj связей).
2. Найти термы возбужденных состояний атомов инертных газов в jI связи.
3. Установить соответствие уровней атома (конфигурация валентных электронов  $p^2$ ) для LS связи с уровнями для случая jI связи.

#### Вариант №4

1. Найти термы атомов с незаполненными оболочками  $p^N$  (N – число электронов в оболочке).
2. Найти термы атомов с незаполненными оболочками  $d^N$  (N – число электронов в оболочке).
3. Найти термы атомов с незаполненными оболочками  $f^N$  (N – число электронов в оболочке).

#### Вариант №5

1. Записать волновую атомную двухэлектронную функцию для LS связи.
2. Записать волновую атомную двухэлектронную функцию для jj связи
3. .

#### Вариант №6

1. Записать двухэлектронную часть нерелятивистского гамильтониана атома в тензорном виде.
2. Изложить основные свойства  $3j$ ,  $6j$  и  $9j$  символов Вигнера

#### Вариант №7

1. Получить правила отбора для электродипольного излучения атома.

2. Получить правила отбора для электроквadrupольного излучения атома.
3. Получить правила отбора для магнитнодипольного излучения атома.

#### Вариант №8

1. Получить схему расщеплений уровней энергии атома Na, последовательно, в отсутствие магнитного постоянного поля, при слабом и сильном постоянных магнитных полях (использовать LS связь).
2. Объяснить различия расщеплений энергетических уровней атома при эффекте Штарка и эффекте Зеемана.

#### Перечень вопросов, выносимых на практические занятия

1. Построить электронные конфигурации произвольных нейтральных атомов и ионов Периодической системы элементов в основном и возбужденных электронных состояниях.
2. Найти наиболее глубокие термы произвольных нейтральных атомов и ионов Периодической системы элементов (в приближении связи LS  $d^N$ ).
3. Найти термы атомов с незаполненными оболочками  $s^N$ ,  $d^N$ ,  $f^N$  ( $N$  – число электронов в оболочке).
4. Вычислить приведенные матричные элементы скалярного тензорного произведения неприводимых тензорных операторов, когда операторы действуют на одинаковые переменные.
5. Вычислить приведенные матричные элементы скалярного тензорного произведения неприводимых тензорных операторов, когда операторы действуют на различные переменные.
6. Получить в одноэлектронном приближении выражения для термов оболочки  $p^2$  в LS связи. Показать выполнение правила Гунда.
7. Получить в одноэлектронном приближении выражения для уровней энергии расщепленных термов оболочки  $p^2$  из-за спин-орбитального взаимодействия в LS связи. Показать выполнение правила Гунда.
8. Провести вычисления методом Хартри-Фока уровней энергий основного и возбужденных состояний атомов и ионов Периодической системы элементов.
9. Провести вычисления методом Хартри-Фока частот оптически активных переходов атомов и ионов. Провести сравнительный анализ с экспериментальными данными.
10. Рассчитать энергию ионизации атомов и ионов Периодической системы элементов. Провести сравнительный анализ с экспериментальными данными.
11. Провести вычисления методом Хартри-Фока волновых функций основного и возбужденных состояний атомов и ионов Периодической системы элементов.

Перечень вопросов, выносимых на экзамен, приведен в разделе 10.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

### Основная литература

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



6. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. - М.:ГИФМЛ. – 1962 (изд.2, 2001).
7. С.З.Фриш. Оптические спектры атомов. М.:ГИФМЛ. – 1963 (2-е изд, исправл., 2021).

#### Дополнительная литература

8. А.П.Юцис, А.А.Бандзайтис. Теория момента количества движения в квантовой механике. - Вильнюс. - 1977.
9. А.П.Юцис, А.Ю.Савукина. Математические основы теории атома.- Вильнюс. - 1973.
10. А.С.Давыдов. Квантовая механика. - М: Наука. - 1973.
11. А.М.Мессиа. Квантовая механика. Т.2.- М: Наука. - 1979.
12. Е.И.Чеглоков. Вариационные принципы в квантовой теории атомных систем. - Томск:ТГУ. - 1983.
13. Нявро А. В. Эволюция состояний: атом-молекула-нанокластер-кристалл. – Томск: ТГУ. – 2011.
14. Электронная база атомных данных NIST: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/>
15. Л.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. - Л: Наука. - 1975.

#### Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

1. Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)
2. Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)
3. Библиографическая база данных ISI Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)
4. Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)
5. Электронные версии специализированных научных журналов

### 13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Office Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной верстки LaTeX; системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, Waterloo Maple;  
 – публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>  
 – Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>  
 – ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>  
 – ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>  
 – Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>  
 – ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>  
 – ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

### 14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, 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.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате, оснащенные системой («Актру»).

#### **15. Информация о разработчиках**

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ, заведующий кафедрой.