

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Теория атомных спектров

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
«Фундаментальная и прикладная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

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 Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

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

Семестр 1, 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 базовыми понятиями общей физики, ее разделов, связанных со взаимодействием излучения с веществом, оптикой, основами высшей математики.

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, jI, 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 кубической 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 осуществляется путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов по лекционному материалу и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

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

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

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(<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

в) План практических занятий по дисциплине.

Тема 1. Типы связи моментов и классификация уровней в атоме. Однородные типы связи LS и jj. Эмпирические правила Гунда, Ланде, Лапорте. Промежуточные типы связи: LK, jl, Jj, jK. Термы конфинураций, состоящих из эквивалентных электронов. Термы смешанных конфигураций.

Тема 2. Спектры щелочных металлов. Спектры щелочно-земельных металлов и He. Основные характеристики спектров атомов с заполняющимися p-оболочками. Спектры атомов с достраивающимися d- и f- оболочками.

Тема 3. 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

Тема 4. Волновая функция оболочки из N неэквивалентных взаимодействующих электронов. Генеалогическая схема. Волновая функция оболочки из N эквивалентных электронов. Генеалогические коэффициенты.

Тема 5. Выражение оператора энергии через неприводимые тензорные операторы. Одноэлектронные операторы. Двухэлектронные операторы.

Тема 6. Мультиплетная структура термов. Сверхтонкая структура термов.

Тема 7. Мультипольные моменты радиационных переходов. Электрические дипольный, квадрупольный и магнитный дипольный моменты. Интенсивность мультипольных переходов. Правила отбора для электронных мультипольных переходов. Точные правила отбора.

Тема 8. Атом в электрическом поле: квадратичный и линейный эффекты Штарка. Атом в магнитном поле: эффекты Зеемана в слабых полях и Пашена-Бака в сильных полях.

Тема 9. Гамильтониан взаимодействия излучения с веществом .

Раздел 10. Феноменологическая теория Эйнштейна. Кинетические уравнения для населенностей, их анализ. Квантовая теория коэффициентов Эйнштейна.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

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

- М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. - М.:ГИФМЛ. – 1962 (изд.2, 2001).
- С.З.Фриш. Оптические спектры атомов. М.:ГИФМЛ. – 1963 (2-е изд, исправл., 2021).
- б) дополнительная литература:
- А.П.Юцис, А.А.Бандзайтис. Теория момента количества движения в квантовой механике. - Вильнюс. - 1977.
- А.П.Юцис, А.Ю.Савукина. Математические основы теории атома.- Вильнюс. - 1973.
- А.С.Давыдов. Квантовая механика. - М: Наука. - 1973.
- А.М.Мессиа. Квантовая механика. Т.2.- М: Наука. - 1979.
- Е.И.Чеглоков. Вариационные принципы в квантовой теории атомных систем. - Томск:ТГУ. - 1983.
- Нявро А. В. Эволюция состояний: атом-молекула-нанокластер-кристалл. – Томск: ТГУ. – 2011.
- Электронная база атомных данных NIST: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/>
- Л.А.Варшавович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. - Л: Наука. - 1975.
- в) ресурсы сети Интернет:
- Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)
- Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)
- Библиографическая база данных ISI Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)
- Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)
- 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 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, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии физического факультета НИИ ТГУ