

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка

Фізичний факультет
Кафедра експериментальної фізики

Затверджено
на засідання кафедри експериментальної
фізики фізичного факультету
Львівського національного університету
Імені Івана Франка
(протокол № __ від _____ 2021 р.)

Завідувач кафедри _____ Волошиновський А.С.

Силабус з навчальної дисципліни

“ СПЕКТРОСКОПІЯ АТОМІВ, МОЛЕКУЛ І КРИСТАЛІВ ”,

**що викладається в межах ОПІ для підготовки бакалавра
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності
104 Фізика та астрономія**

Спеціалізація: Фізика та астрофізика

Львів

Назва дисципліни	Спектроскопія атомів, молекул і кристалів
Адреса викладання дисципліни	79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8а
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра експериментальної фізики
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки Спеціальність: <i>104 Фізика та астрономія</i> Спеціалізація: <i>Фізика та астрофізика</i>
Викладачі дисципліни	Гамерник Р.В., кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики.
Контактна інформація викладачів	r.gamernyk@ukr.net
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка дисципліни	
Інформація про дисципліну	Курс «Спектроскопія атомів, молекул і кристалів» розроблено таким чином, щоб надати учасникам відповідні загальні та фахові компетентності засновані на розумінні закономірностей спектроскопії кристалів. У курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачені практичні заняття з отримання основних енергетичних параметрів кристалів.
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Спектроскопія атомів, молекул і кристалів» є нормативною навчальною дисципліною з спеціальності: 104 – Фізика та астрономія, спеціалізації «Фізика та астрофізика», яка викладається у 8 семестрі в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Програма навчальної дисципліни передбачає ознайомлення із основними тенденціями у розвитку спектроскопії з часовим розділенням, математичними методами обробки результатів часових вимірювань, технікою вимірювань фемтосекундних імпульсів, люмінесцентною спектроскопією з часовим розділенням, міграційними процесами.
Мета та цілі дисципліни	Мета Ознайомити студентів з послідовним розвитком сучасних уявлень про атомну будову речовини на основі квантової механіки, загальними питаннями атомної і молекулярної спектроскопії, новітніми досягненнями в галузі атомної та молекулярної спектроскопії. Ознайомлення з інформаційними можливостями та сучасними методичними засобами оптико-спектральних досліджень кристалів. Завдання – Навчити студентів критично оцінювати різні методи моделювання і математичного опису процесів, які

	<p>відбуваються на атомному та молекулярному рівнях. Аналізуються різні типи оптичних спектрів кристалів (спектри фундаментального поглинання і відбивання, екситонні спектри, фононні та домішкові спектри тощо) як при накладанні зовнішніх полів, так і без полів. Аналіз ведеться в плані одержання інформації про енергетичну структуру кристалів.</p> <p>Підготувати студентів до сприймання і глибокого розуміння спеціальних теоретичних курсів, зокрема квантової механіки.</p>
<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Кондиленко И.И., Коротков П.А. Введение в атомную спектроскопию. Киев: Высшая школа, 1976. – 304 с. 2. Колінько М.І., Крочук А.С. Атомна спектроскопія: навч. посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка. 2005. 194 с. 3. Довгий Я.О. Електронна будова і оптика нелінійних кристалів: Монографія / Я.О. Довгий, І.В. Кітик. – Львів: Світ, 1996. –176 с. 4. Мельничук С.В. Теорія груп у фізиці молекул і кристалів: навч.посібник для студ. фізичн. спец. ун-тів / С.В. Мельничук. – К.: ІЗМН, 1997. – 304 с. 5. Милославський В.К. Спектроскопія твердого тіла: навч.посібник для студ. фізичн. спец. ун-тів / В.К. Милославський, Л.А.Агеєв. – Харків, 2013. – 276 с. 6. А.С.Крочук, М.С.Підзирайло, З.А.Хапко, О.Т.Антоняк. – Методичні вказівки для виконання лабораторних робіт з молекулярної спектроскопії і люмінесценції. – Львів: Вид. ЛНУ, 2000, 2004. – 38 с. 7. Wikipedia. http://www.wikipedia.org
<p>Тривалість курсу</p>	<p>Один семестр (8 семестр).</p>
<p>Обсяг курсу</p>	<p>120 годин, з яких 64 години аудиторних занять, з них 32 години лекцій, 32 год. лабораторних занять та 56 годин самостійної роботи.</p>
<p>Очікувані результати навчання</p>	<p>У результаті вивчення даного спецкурсу студент повинен знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - експериментальні положення, що висвітлюються в атомній і молекулярній спектроскопії; - основні задачі сучасної атомно-молекулярної фізики; - закономірності побудови спектральних термів електронів в атомах і молекулах; - зв'язок між квантовими характеристиками і властивостями атомів і молекул; - порівняльні квантові характеристики речовини в різних агрегатних станах; - властивості молекул та структуру молекулярних спектрів; - зв'язок структури оптичних спектрів кристалів з їх енергетичною структурою; - спектри і структуру різних центрів в кристалах; - процеси міграції і трансформації енергії оптичного збудження в кристалах;

	<ul style="list-style-type: none"> - діагностику лінійних та нелінійних відгуків кристалічної системи при взаємодії з оптичним випромінюванням; - ідентифікацію за структурою оптичних спектрів різних елементарних збуджень в кристалах; - вплив фазових переходів на оптичні властивості кристалів. <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - володіти методами розрахунку та побудови атомних та молекулярних спектрів; - систематизувати енергетичні рівні та стани атомів і молекул; - передбачити можливі фізичні властивості атомів на підставі аналізу їх квантових станів; - знаходити зв'язок між електронними, коливними та обертовими спектрами молекул; - планувати і здійснювати простіші експерименти по дослідженню атомних станів; - систематизувати спектри атомів і молекул на основі сучасних моделей. - систематизувати елементарні частинки на основі сучасних уявлень. - проводити аналіз Крамерса-Кроніга, тобто розраховувати оптичні функції на основі вимірних спектрів відбивання; - проводити температурні дослідження спектрів кристалів; - визначати параметри екситонів Ваньє-Мотта; - оцінювати тип і характер електрон-фононної взаємодії за аналізом форми спектральних контурів; - проводити поляризаційні дослідження спектрів анізотропних кристалів; - визначати типи міжзонних квантових переходів в кристалах широкозонних напівпровідників; - застосовувати методи теоретико-групового аналізу для ідентифікації міжзонних переходів.
Ключові слова	Рівні енергії, теорія груп і спектроскопія, енергетичний спектр електронів, дисперсія оптичних параметрів.
Формат курсу	Очний: проведення лекцій, лабораторних занять та консультації для поглибленого розуміння тем.
Теми	Наведено у табл.1.
Підсумковий контроль, форма	залік в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з Оптики, Атомної фізики, Техніки і методи спектрального аналізу.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, дискусія, виконання лабораторних робіт, підготовка доповідей, рефератів.
Необхідне обладнання	Лекційні заняття – мультимедійна установка та ноутбук. Лабораторні заняття – обладнання навчальних лабораторій:

	молекулярної спектроскопії та оптики і спектроскопії твердого тіла.
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100- бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • робота на лекціях – 20 балів; • допуск до лабораторних робіт та захист лабораторних робіт – 50 балів; • колоквіум – 20 балів. • Підсумкове заняття – 10 балів. <p>Разом: 100 балів. Підсумкова максимальна кількість балів: 100.</p>
Питання до заліку (чи питання на контрольні роботи)	<ol style="list-style-type: none"> 1. В ідеальному випадку по поверхні металів поширюється ТМ-хвиля. Показати, як повинна змінитися поверхня металів для виникнення поверхневої ТЕ-хвилі. 2. Вказати спектральну область для збудження ТМ-хвилі на поверхні благородних металів Ag, Au і Cu. 3. Для визначення оптичних постійних металів еліпсометричними методами в ІЧ-області спектра користуються поляризаційними стопами. Знаючи показник заломлення селену, знайти оптимальні умови (число шарів в стопі і кут падіння) для отримання ступеня поляризації більше 95%. 4. Побудувати елементарну комірку оберненої ґратки для кубічної гранецентрованої і об'ємцентрованої кристалічних ґраток. 5. Побудувати таблицю множення для кристалічного класу $S4v$, визначити число елементів, що входять в групу, і розкласти групу в класи самоспряжених елементів. 6. Знайти число незвідних представлень групи $S4v$ і їх розмірність. Обчислити таблицю характеристик групи. 7. Кристали бінарних сполук GaN, ZnO та ін. мають структуру типу вюрциту. Знаючи елементарну комірку кристалічної ґратки, визначити її кристалічний клас. Знайти число незвідних представлень і їх розмірність для знайденого кристалічного класу. 8. Побудувати зону Бріллюена кристалічних ґраток типу вюрциту при відомих параметрах елементарної комірки. 9. Чому в кристалах з іонним зв'язком і молекулярних кристалах внутрішні коливання зберігаються при їх розчиненні в рідинах? 10. Дати роз'яснення загального підйому спектра поглинання в кристалах германію при підвищенні температури до 300 К. 11. Показати, в яких точках зони Бріллюена будуть спостерігатися особливості в спектрах двохфононного

	<p>поглинання.</p> <p>12. Пояснити, чому розмірне квантування електронного спектра в металевих наночастинках не проявляється в оптичних спектрах тонких гранулярних плівок при розмірі гранул навіть меншому 10 нм.</p> <p>13. Для теоретичного аналізу оптичних спектрів вільних носіїв струму в металах і напівпровідниках потрібне знання концентрації електронів і дірок в зразках. З цією метою необхідні вимірювання питомого опору і ЕРС Холла на тих же зразках. Дати обґрунтування необхідності цих вимірів.</p> <p>14. У лужноземельних металах виникає рівна концентрація електронів і дірок ($n = p$). Поясніть, чому постійна Холла в цих металах на кілька порядків більше, ніж в лужних металах, але не дорівнює нескінченності.</p> <p>15. Вивести формулу для густини станів в підзоні Ландау, енергія в яких підпорядкована закону дисперсії.</p> <p>16. Довести, що ефект Фарадея належить до методів модуляційної спектроскопії при заданому зєсманівському розщепленні атомних ліній або екситонних смуг в магнітному полі.</p> <p>17. Запропонувати різні схеми визначення кута повороту площини поляризації при фарадеевському повертанні, в тому числі нульовий метод при нерухомому поляризаторі на виході магніту.</p> <p>18. Френкель побудував модель екситону малого радіусу на прикладі кристалів інертних газів. Однак більш пізні експерименти показали, що в спектрах цих кристалів спостерігаються екситонні піки, положення яких підпорядковується моделі екситону великого радіуса. Знаючи електронні стани збуджених ізольованих атомів інертних елементів, пояснити появу в кристалах екситонів Ваньє-Мотта. Чому Френкель при побудові своєї теорії вибрав як приклад кристали інертних газів?</p> <p>19. Поясніть, чому в кристалах дейтеробензолу з малою домішкою бензолу спостерігаються лінії поглинання, властиві «вільній» молекулі бензолу, але зі збільшенням концентрації бензолу виникає розщеплення ліній на дві компоненти, що зростає з ростом концентрації домішки.</p> <p>20. Вказати атоми, які можуть бути використані в якості донорів і акцепторів в арсеніді галію. При підборі атомів врахувати їх радіуси.</p> <p>21. Проведіть розрахунок залежності від температури рівня Фермі в напівпровіднику з акцепторними центрами.</p>
--	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

	<p>Побудуйте графік залежності E_F від T.</p> <p>22. Нехай донори введені в частину напівпровідника і межа між областю легованою донорами і областю вільної від них пряmolінійна. Показати, що в прикордонній області виникає потенційний бар'єр, висота якого залежить від ширини забороненої зони E_g. Знайти висоту потенційного бар'єру і показати, що при малій концентрації донорних центрів величина E_g зберігається на всьому проміжку напівпровідника.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу «Спектроскопія атомів, молекул і кристалів»

Тиж-день	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Додаткова література / ресурс для виконання завдань (за потреби)	Термін виконання
1	Основні квантові закони.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 2 год.		1 тиждень
2	Загальні характеристики спектрів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 2 год.		1 тиждень
3	Спектри лужних металів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
4	Спектри багатоелектронних атомів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
5	Типи молекулярних спектрів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
6	Обертання молекул, обертові спектри.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
7	Коливні спектри молекул.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 6 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
8	Електронні спектри молекул.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
9	Універсальна класифікація кристалів за типами хімічних зв'язків.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
10	Основні засади теорії груп. Оптичні властивості і спектри металів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 4 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
11	Теорія груп і спектроскопія. Енергетич-	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год.		1 тиждень

	ний спектр електронів у твердих тілах.	самостійна роб. – 4 год.		
12	Енергетичні спектри і взаємодія світла з кристалами.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
13	Поглинання світла твердими тілами.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 4 год.		1 тиждень
14	Дисперсія оптичних параметрів твердих тіл. Екситони в напівпровідниках і діелектриках.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна робота – 4 год.		1 тиждень
15	Електронний спектр домішок у твердих тілах.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 2 год.		1 тиждень
16	Деякі методичні питання спектроскопії кристалів.	Лекції – 2 год. лабор. заняття – 2 год. самостійна роб. – 2 год.		1 тиждень