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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО: Декан физического факультета С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

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

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- − ОПК-2 − способность проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;
- $-\Pi$ К-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. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля.

- посещаемость;
- опрос на лекции и практических занятиях.

Критерии оценивания:

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты участия в работе в течение лекции и на практических занятиях, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом):

- посещаемость, максимальный балл 10,
- выступление и работа на лекцииях/практических занятиях, максимальный балл 10 баллов на олном занятии.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Экзамен в 1 семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет включает 2 вопроса (перечень вопросов приведен ниже), проверяющих сформированность компетенции ПК-1 в соответствии с индикаторами ИПК-1.1 и ИПК-1.2. Ответы даются в развернутой форме. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Критерии оценивания.

На промежуточную аттестацию планируется не более 50 баллов.

Итоговая оценка по дисциплине складывается из суммы баллов, полученных по итогам текущего контроля и промежуточной аттестации.

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: 100-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-50 – «удовлетворительно», менее 50 – «неудовлетворительно».

Оценка «отлично», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны правильные ответы на все теоретические вопросы по билету, а также даны правильные ответы на дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса.

Оценка «хорошо», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неполные правильные ответы на теоретические вопросы по билету, но имеются так же правильные ответы на часть дополнительных и/или уточняющих вопросов по основным темам и содержанию курса.

Оценка «удовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неправильные ответы на теоретические вопросы, но при этом даны правильные ответы на дополнительные и/или уточняющие вопросы по основным темам и содержанию курса.

Оценка «неудовлетворительно», с учетом промежуточной успеваемости, выставляется, если даны неправильные ответы на оба теоретических вопроса билета и отсутствуют ответы на дополнительные или уточняющие вопросы.

Перечень теоретических вопросов, выносимых на экзамен.

- 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 щелечно-земельных металлов и *Не*.
- 8. Сложение трех угловых моментов. 6ј символы.
- 9. Волновая функция оболочки из N неэквивалентных взаимодействующих электронов. Генеалогическая схема.
- 10. Основные характеристики спектров атомов с заполняющимися р-оболочками.
- 11. Вычисление приведенного матричного элемента оператора углового момента Ј.
- 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-Эккарта.
- 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 осциллчторов.
- 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 l^3).

- 35. Спектры атомов с достраивающимися d и f оболочками. Особенности классификации состояний \mathbf{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. Диамагнитная восприимчивость.
- 77. Классическая модель уширения столкновением.
- 78. Квантовомеханическая теория уширения столкновением.

Ударное приближение в теории уширения столкновением. Приближения Андерсена-Тсао-Курнюта, Робера-Бонами, приближение точных траекторий.

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.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Проверка сформированности компетенций ИОПК-2, ПК-1 в соответствии с индикаторами достижения ИОПК-2.2, ПК-1.

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 jl связи.
- 3. Установить соответствие уровней атома (конфигурация валентных электронов p^2) для LS связи с уровнями для случая jl 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 јј связи

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 электроквадрупольного 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.

Информация о разработчиках

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии ФФ НИ ТГУ