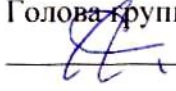
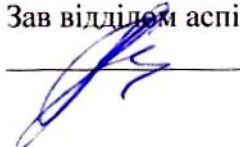


ЗАТВЕРДЖЕНО
на засіданні групи забезпечення
спеціальності 104 «Оптика і спектроскопія
квантових систем»
від «25» березня 2021 року
протокол № 3
Голова групи забезпечення
 Свиначенко А.А.

УЗГОДЖЕНО
Зав відділом аспірантури і докторантури
 Вітовська О. Т.

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

«МОЛЕКУЛЯРНА ОПТИКА ТА СПЕКТРОСКОПІЯ»

(назва навчальної дисципліни)

104 Фізика та астрономія

(шифр та назва спеціальності)

Оптика і спектроскопія квантових систем

(назва освітньої програми)

третій, денна

(рівень вищої освіти) (форма навчання)

2

3

5/150

залік

(рік навчання) (семестр навчання) (кількість кредитів ЄКТС/годин) (форма контролю)

Вищої та прикладної математики

(кафедра)

Автори:

Глушков О.В., зав. кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., професор;
Свинаренко А.А., професор кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., професор;
Хецеліус О.Ю., професор кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., професор;
Ігнатенко Г.В., доцент кафедри вищої та прикладної математики, к.ф.-м.н., доцент

Рецензенти:

Сминтина В.А., д.ф.-м.н., професор (Одеський національний університет ім.І.Мечникова);
Тюрін О.В., д.ф.-м.н., професор (Одеський національний університет ім.І.Мечникова);
Шевчук В.Г., д.ф.-м.н., професор (Одеський національний університет ім.І.Мечникова);

Поточна редакція розглянута на засіданні кафедри вищої та прикладної математики
від «_30_»_08_2021 р., протокол № 1.

Викладачі:

лекційні заняття:

Хецеліус О.Ю., проф. кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., професор;

практичні заняття:

Ігнатенко Г.В., доцент кафедри вищої та прикладної математики, к.ф.-м.н., доцент;

контактна інформація: телефон кафедри: (0482) 32-67-39, електронна адреса:

okhetsel@gmail.com, ignatenkoav13@gmail.com, електронна адреса кафедри: math@odeku.edu.ua

Перелік попередніх редакцій

| Прізвища та ініціали авторів | Дата, № протоколу | Дата набуття чинності |
|------------------------------|-------------------|-----------------------|
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ЗМ-Л1 – змістовий лекційний модуль №1

ЗМ-Л2 – змістовий лекційний модуль №2

ЗМ-П1 – змістовий практичний модуль №1

ЗМ-П2 – змістовий практичний модуль №2

ЗМ-КуР – змістовий практичний модуль з виконання курсової роботи

ОЗ – оцінка роботи здобувача освіти за всіма змістовими модулями

ОКР – оцінка залікової контрольної роботи

В – інтегральна оцінка поточної роботи здобувача освіти по дисципліні

ЄКТС – Європейська кредитно-трансферна система

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

| | |
|--|--|
| Мета навчальної дисципліни | Засвоєння (забезпечення) низки компетентностей, зокрема, оволодіння сучасним апаратом молекулярної оптики та спектроскопії, а також здатність розвитку нових та удосконалення існуючих методів опису спектрів двоатомних та багатоатомних молекул, їх енергетичних та спектроскопічних характеристик на основі методів квантової механіки атомів та квантової електродинаміки |
| Компетентності, які повинні бути набуті або розвинуті | <i>K14</i> Здатність отримувати нові знання про оптичні та спектроскопічні властивості атомів, молекул, твердих тіл, їх взаємодію із інтенсивним електромагнітним (лазерним) випромінюванням, утворення когерентних джерел світла, оптичний запис інформації тощо, робити наукові узагальнення, осмислювати результати наукових досліджень та співвідносити висновки з граничними випадками сучасних теорій квантової фізики <i>K15</i> Здатність ефективно застосовувати обчислювальні методи оптики та динаміки квантових та лазерних систем з метою встановлення зв'язку між натурними експериментами та результатами комп'ютерних обчислень, які можуть бути великого обсягу та вимагають застосування потужних обчислювальних ресурсів |
| Програмні результати навчання | <i>P141</i> Критично оцінювати переваги і обмеження наукових теорій та концептуальних моделей, що описують, процеси випромінювання світла, його поширення, поглинання в середовищах різної природи, взаємодії електромагнітного випромінювання з атомами, молекулами, твердими тілами, утворення когерентних джерел світла, оптичний запис інформації, та отримувати нові знання на основі власних досліджень <i>P151</i> Використовувати у власних дослідженнях сучасні стандартні обчислювальні методи та алгоритми для чисельного дослідження енергетичних та спектроскопічних характеристик атомів, молекул, твердих тіл, основних властивостей квантових та лазерних систем, взагалі систем у сфері оптики та лазерної фізики, а також удосконалювати існуючі та створювати нові фізичні, математичні і комп'ютерні моделі в оптиці та спектроскопії різноманітних фізичних (квантових) систем відповідно до потреб дисертаційного дослідження |
| Очікувані результати навчання | Атомні та молекулярні спектри, взаємодії електромагнітного випромінювання з атомами, молекулами, твердими тілами, утворення когерентних джерел світла, оптичного запису інформації тощо. |
| Базові знання | Використовувати сучасні або розроблювати нові підходи, зокрема, на основі методів квантової механіки, електродинаміки, квантової хімії, а також методів релятивістської квантової теорії тощо до опису спектрів атомів та іонів, їх енергетичних та спектроскопічних характеристик. |
| Базові вміння | Створення комп'ютерних програм на основі алгоритмічних мов «Фортран», C++ та інших, використання комплексу програм «Geomath». |
| Базові навички | Немає |
| Попередня дисципліна | Обчислювальні методи оптики та динаміки квантових та лазерних систем |
| Наступна дисципліна | Науково-педагогічна практика |
| Кількість годин | лекції – 30 год., практичні заняття – 45 год., самостійна робота – 75 год. |

2. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

2.1. Лекційний модуль

| Код | Назви змістовних модулів та перелік тем лекційних занять | Кількість годин | |
|--------------|--|-----------------|----------------|
| | | Ауди-торні | Самост. робота |
| ЗМ-Л1 | Введення в молекулярну оптику та спектроскопію. Основні типи молекулярних спектрів. Квантова механіка молекул. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. Коливальна та обертальна структура електронних смуг | 15 | 15 |
| Л1.1 | Молекула як система взаємодіючих частинок. Поділ енергії молекули на складові. Квантово-механічна модель молекули. Рівняння Шредінгера для молекули. Наближення Борна-Оппенгеймера. Поділ енергії молекули на складові. Основні типи молекулярних спектрів. Двоатомні молекули. Рішення рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню та молекули водню. | 2 | 2 |
| Л1.2 | Молекула як жорсткий ротатор. Обертання і обертальна енергія двоатомних молекул. Рішення рівняння Шредінгера для жорсткого ротатора. Рівні енергії і спектр жорсткого ротатора. Нежорсткий ротатор. Молекула як гармонійний осцилятор. Гармонійні коливання двоатомних молекул. Рішення рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора. Рівні енергії і спектр гармонічного осцилятора. | 2 | 2 |
| Л1.3 | Порівняння теоретичних та експериментальних спектрів жорсткого ротатора і гармонічного осцилятора. Молекула як ангармонічний осцилятор. Крива потенційної енергії реальної молекули. Власні функції і правила відбору для ангармонічного осцилятора. Суцільний спектр термів і дисоціація молекул. Функція Морзе. | 2 | 2 |
| Л1.4 | Спектри комбінаційного розсіювання світла. Комбінаційне розсіювання світла. Коливальний і обертальний спектри КР. Інтенсивності ліній в КР-спектрі. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. R- і P-гілки обертальної структури коливального спектра. | 2 | 2 |
| Л1.5 | Ізотопічний ефект в спектрах двоатомних молекул. Визначення обертальних постійних і міжатомних відстаней двухатомних молекул по ІК-Фур'є спектрами поглинання. Розподіл інтенсивностей ліній в коливально-обертальних спектрах. Залежність інтенсивності спектральних ліній від розподілу молекул по енергетичним станам. | 2 | 2 |
| Л1.6 | Відносна заселеність коливальних рівнів енергії. Відносна заселеність обертальних рівнів енергії. Коливальна структура електронних смуг. Електронні переходи двоатомних молекул. Коливальна структура електронних смуг. Розподіл інтенсивності в електронно-коливальних спектрах. | 2 | 2 |
| Л1.7 | Принцип Франка-Кондона. Визначення молекулярних постійних по електронним спектрам поглинання молекул. Обертальна структура електронних смуг. Обертальна структура електронного переходу. Освіта канта. Відтінення смуг. Діаграма Фортрей. Комбінаційні співвідношення. Визначення обертальних постійних. | 3 | 3 |
| ЗМ-Л2 | Динаміка та спектроскопія електронних станів молекули. Електронні стани і хімічний зв'язок в молекулах. Оптика і спектроскопія багатоатомних молекул. Електронні стани багатоатомних молекул | 15 | 15 |
| Л2.1 | Класифікація електронних станів молекули. Зв'язки Гунда. Повний момент кількості руху електронів. Проекція повного орбітального моменту по осі двоатомної молекули. Мультиплетність станів. Класифікація електронних станів молекули. Взаємодія обертального руху з електронним рухом. Зв'язки Гунда. | 1 | 1 |

| Код | Назви змістовних модулів та перелік тем лекційних занять | Кількість годин | |
|---------------|---|-----------------|--------------|
| | | Ауди-торні | Самост. роб. |
| Л2.2 | Властивості симетрії власних функцій молекул. Властивості симетрії електронної власної функції. Симетрія обертальних власних функцій. Позитивні і негативні обертальні рівні. Симетричні і антисиметричні обертальні рівні для молекул, що мають однакові ядра. Типи електронних переходів. Принципи побудованій електронних конфігурацій. | 2 | 2 |
| Л2.3 | Визначення електронних станів з роз'єднаних атомів. Визначення молекулярних термів з станів об'єданого атома. Визначення різноманіття термів по електронній конфігурації. Електронні стани і хімічний зв'язок в молекулах. Метод валентних зв'язків. Метод молекулярних орбіталей. Види хімічного зв'язку в молекулах. | 2 | 2 |
| Л2.4 | Два основних наближених методу розрахунку хімічних зв'язків: метод валентних зв'язків і метод молекулярних орбіталей. Багатоатомні молекули. Елементи симетрії і точкові групи симетрії молекул. Форма і розміри багатоатомних молекул. Симетрія молекул і основи теорії груп. Точкові групи нижчої, середньої і вищої симетрії. Загальні висновки про симетрії молекули. | 2 | 2 |
| Л2.5 | Обертання багатоатомних молекул. Обертальні спектри лінійних молекул. Ефект Штарка. Коливальні спектри багатоатомних молекул. Нормальні коливання багатоатомних молекул. Класифікація нормальних коливань багатоатомних молекул по їх формі. Класичне рішення задачі про малі коливання багатоатомних молекул. Квантово-механічне рішення коливальної задачі. | 2 | 2 |
| Л2.6 | Загальні принципи класифікації коливань по їх симетрії. Координати симетрії. Рішення завдання про коливання молекул при обліку властивостей симетрії. Типові коливання багатоатомних молекул. Поняття про характеристичності частот коливань молекулярних фрагментів. Характеристичні частоти ІК-поглинання основних класів сполук. | 2 | 2 |
| Л2.7 | Структурний молекулярний аналіз по інфрачервоному спектру поглинання. Ідентифікація органічних сполук по ІК-Фур'є спектрам. Електронні стани багатоатомних молекул. Електронні стани та хімічний зв'язок в багатоатомних молекулах. Електронні спектри поглинання багатоатомних молекул. Класифікація електронних переходів. | 2 | 2 |
| Л2.8 | Застосування електронних спектрів поглинання. Кількісний аналіз двокомпонентної системи за електронними спектрами поглинання. Спектрофотометричний метод визначення складу комплексних сполук в розчинах по електронним спектрам поглинання багатоатомних молекул | 2 | 2 |
| Разом: | | 30 | 30 |

Консультації проводить професор Глушков О.В. щопонеділка з 15.00 до 17.00 в ауд. 407, можливі он-лайн консультації через Skype або Wiber; для узгодження часу он-лайн консультацій слід надіслати запит на електронну пошту викладача: glushkovav@gmail.com, math@odeku.edu.ua

2.2. Практичний модуль

| Код | Назви змістовних модулів та перелік тем практичних занять | Кількість годин | |
|--------------|--|-----------------|--------------|
| | | Ауди-торні | Самост. роб. |
| ЗМ-П1 | Методи рішення рівняння Шредінгера для молекул в різних наближеннях. Молекула як гармонійний осцилятор. Теоретичне обчислення коливально-обертальних спектрів двоатомних молекул. Коливальна структура електронних смуг | 25 | 15 |
| П1.1 | Молекула як система взаємодіючих частинок. Поділ енергії молекули на складові. Квантово-механічна модель молекули. Рівняння Шредінгера для молекули. Наближення Борна-Оппенгеймера. Поділ енергії молекули на складові. Основні типи молекулярних спектрів. Двоатомні молекули. Рішення рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню та молекули водню. Молекула як жорсткий ротатор. Обертання і обертальна енергія двоатомних молекул. Модель жорсткого ротатора. | 5 | 3 |
| П1.2 | Рішення рівняння Шредінгера для жорсткого ротатора. Рівні енергії і спектр жорсткого ротатора. Нежорсткий ротатор. Молекула як гармонійний осцилятор. Гармонійні коливання двоатомних молекули. Рішення рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора. Рівні енергії і спектр гармонічного осцилятора. Порівняння теоретичних та експериментальних спектрів жорсткого ротатора і гармонічного осцилятора. | 5 | 3 |
| П1.3 | Молекула як ангармонічного осцилятор. Крива потенційної енергії реальної молекули. Власні функції і правила відбору для ангармонічного осцилятора. Суцільний спектр термів і дисоціація молекул. Функція Морзе. Спектри комбінаційного розсіювання світла. Комбінаційне розсіювання світла. Коливальний і обертальний спектри КР. Інтенсивності ліній в КР-спектрі. Молекула як коливається ротатор. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. | 5 | 3 |
| П1.4 | R- і P-гілки обертальної структури коливального спектра. Ізотопічний ефект в спектрах двохатомних молекул. Визначення обертальних постійних і міжатомних відстаней двухатомних молекул по ІК-Фур'є спектрами поглинання. Розподіл інтенсивностей ліній в коливально-обертальних спектрах. Залежність інтенсивності спектральних ліній від розподілу молекул по енергетичним станам. Сума по станам. Відносна заселеність коливальних рівнів енергії. Відносна заселеність обертальних рівнів енергії. Коливальна структура електронних смуг. | 5 | 3 |
| П1.5 | Електронні переходи двоатомних молекул. Коливальна структура електронних смуг. Розподіл інтенсивності в електронно-коливальних спектрах. Принцип Франка-Кондона. Визначення молекулярних постійних по електронним спектрам поглинання молекул. Обертальна структура електронних смуг. Обертальна структура електронного переходу. Освіта канта. Відтінення смуг. Діаграма Фортрей. Комбінаційні співвідношення. Визначення обертальних постійних. | 5 | 3 |
| ЗМ-П2 | Класифікація електронних станів молекули. Визначення молекулярних термів | 20 | 10 |
| П2.1 | Класифікація електронних станів молекули. Зв'язки Гунда. Повний момент кількості руху електронів. Проекція повного орбітального моменту по осі двоатомних молекули. Мультиплетність станів. Класифікація електронних станів молекули. Взаємодія обертованого руху з електронним рухом. Зв'язки Гунда. Властивості симетрії власних функцій молекул. Властивості симетрії електронної власної функції. Симетрія обертованих власних функцій. Позитивні і негативні вращательні рівні. Симетричні і антисиметричні обертальні рівні для молекул, що мають однакові ядра. | 10 | 5 |

| Код | Назви змістовних модулів та перелік тем лекційних занять | Кількість годин | |
|----------------|--|-----------------|----------------|
| | | Ауди-торні | Самост. робота |
| П2.2 | Симетрія обертальних рівнів з ура-те електронних власних функцій. Типи електронних переходів. Принципи побудованій електронних конфігурацій. Визначення електронних станів з роз'єднаних атомів. Визначення молекулярних термів з станів об'єданого атома. Визначення термів по електронній конфігурації. Електронні стану і хімічний зв'язок в молекулах. Метод валентних зв'язків. Метод молекулярних орбіталей. Види хімічного зв'язку в молекулах. Два основних наближених методу розрахунку хімічних зв'язків: метод валентних зв'язків і метод молекулярних орбіталей. | 10 | 5 |
| ЗМ-КурР | Курсова робота | - | 15 |
| | Підготовка до заліку | | 5 |
| Разом: | | 45 | 45 |

Консультації проводить професор Глушков О.В. щопонеділка з 15.00 до 17.00 в ауд. 407, можливі он-лайн консультації через Skype або Wiber; для узгодження часу он-лайн консультацій слід надіслати запит на електронну пошту викладача: glushkovav@gmail.com, math@odeku.edu.ua

2.3. Самостійна робота

| Код | Узагальнені дані по всіх змістових модулях про завдання на самостійну роботу | Кількість годин | Строк проведення |
|--------------|--|-----------------|------------------|
| ЗМ-Л1 | • Самопідготовка до лекцій, опрацювання теоретичного матеріалу за конспектами лекцій і рекомендованими навчальними посібниками, монографічній навчальній літературі, включаючи інформаційні загальноосвітні ресурси; | 3 | 1-8 тижні |
| | • Виконання завдань на самостійну роботу, підготовка до усного опитування або тестування; | 3 | |
| | • Самостійне вивчення з рекомендованого переліку додаткових теоретичних питань, нерозглянутих на лекціях, | 2 | |
| | • Виконання запропонованих викладачем додаткових завдань на самостійну роботу з метою поглиблення та закріплення знань, розвитку аналітичних навичок з проблематики навчальної дисципліни. | 2 | |
| | • Підготовка до модульної контрольної роботи (обов'язкова) | 5 | |
| ЗМ-Л2 | • Самопідготовка до лекцій, опрацювання теоретичного матеріалу за конспектами лекцій і рекомендованими навчальними посібниками, монографічній навчальній літературі, включаючи інформаційні загальноосвітні ресурси; | 3 | 9-15 тижні |
| | • Виконання завдань на самостійну роботу, підготовка до усного опитування; | 3 | |
| | • Самостійне вивчення з рекомендованого переліку додаткових теоретичних питань, нерозглянутих на лекціях, | 2 | |
| | • Виконання запропонованих викладачем додаткових завдань на самостійну роботу з метою поглиблення та закріплення знань, розвитку аналітичних навичок з проблематики навчальної дисципліни. | 2 | |
| | • Підготовка до модульної контрольної роботи (обов'язкова) | 5 | |

| Код | Узагальнені дані по всіх змістових модулях про завдання на самостійну роботу | Кількість годин | Строк проведення |
|---------------|---|-----------------|------------------|
| ЗМ-П1 | • Самопідготовка до практичних занять, повторення раніше вивченого теоретичного матеріалу; | 3 | 1-8 тижні |
| | • Виконання завдань на самостійну роботу, у тому числі розв'язування окремих задач і прикладів, проведення типових розрахунків за даними, отриманими на практичних заняттях, підготовка до презентації результатів; | 3 | |
| | • Підготовка до усного опитування або тестування, перевірки практичних робіт у форматі взаємного оцінювання та обґрунтованих висновків; | 2 | |
| | • Розв'язування додаткових задач за тематикою практичних занять. | 2 | |
| | • Підготовка до модульної контрольної роботи (обов'язкова) | 5 | |
| ЗМ-П2 | • Самопідготовка до практичних занять, повторення раніше вивченого теоретичного матеріалу; | 2 | 9-15 тижні |
| | • Виконання завдань на самостійну роботу, у тому числі розв'язування окремих задач і прикладів, проведення типових розрахунків за даними, отриманими на практичних заняттях, підготовка до презентації результатів; | 1 | |
| | • Підготовка до усного опитування або тестування, перевірки практичних робіт у форматі взаємного оцінювання та обґрунтованих висновків; | 1 | |
| | • Розв'язування додаткових задач за тематикою практичних занять. | 1 | |
| | • Підготовка до модульної контрольної роботи (обов'язкова) | 5 | |
| ЗМ-КуР | • Виконання етапів курсової (дослідницької) роботи згідно завдання, виданого викладачем; | 10 | 2-12 тижні |
| | • Підготовка до захисту курсової роботи (обов'язкова). | 5 | 13-14 тижні |
| ОКР | • Підготовка до залікової контрольної роботи (обов'язкова). | 5 | 14-15 тижні |
| Разом: | | 75 | |

3. РЕКОМЕНДАЦІЇ ДО САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ АСПІРАНТІВ

3.1. Повчання

Самостійна робота є основним засобом засвоєння здобувачем вищої освіти навчального матеріалу дисципліни «Обчислювальні методи оптики та динаміки квантових та лазерних систем» в поза аудиторний час, що регламентується навчальним планом.

Базова (обов'язкова) самостійна робота аспіранта включає:

- самопідготовку до лекційних та практичних занять;
- опрацювання нового та повторення раніше вивченого теоретичного матеріалу;
- виконання завдань на самостійну роботу: підготовка інформаційного повідомлення в усній та письмовій формі, складання опорного конспекту, графічне представлення матеріалу (складання схем, рисунків, графіків, діаграм), складання тестів та еталонних відповідей до них, створення матеріалів презентацій, проведення типових розрахунків за даними, отриманими на практичних заняттях;
- підготовку до усного опитування або тестування;

- підготовку до заліку (залікової контрольної роботи).
- виконання курсової роботи та підготовку до її захисту;
- підготовку до залікової контрольної роботи.

Додаткова самостійна робота спрямована на поглиблення та закріплення знань здобувачів освіти, розвиток їх аналітичних навичок з проблематики навчальної дисципліни. Невичерпний перелік заходів може включати:

- самостійне вивчення з рекомендованого переліку додаткових теоретичних питань, нерозглянутих на лекціях;
- розв'язування додаткових задач за тематикою практичних занять;
- виконання творчих аналітично-розрахункових робіт;
- аналіз наукової публікації за визначеною викладачем темою;
- аналіз наукових матеріалів по заданій темі зі складанням схем та моделей на підставі отриманих результатів;
- поглиблений аналіз науково-методичної літератури (підготовка рецензій, анотацій на статтю або посібник, складання анотованого списку статей із відповідних журналів по галузі знань, складання глосарія по конкретній темі, аналітичний звіт з побудови наукової гіпотези за обраною аспірантом тематикою дослідження та ін.);
- пошук додаткових матеріалів, які можуть бути використані для написання курсової (дослідницької) роботи.

Самостійна робота над засвоєнням навчального матеріалу з дисципліни може виконуватися у бібліотеці, читальних залах бібліотеки Одеського державного екологічного університету, навчальних кабінетах, комп'ютерних класах, у домашніх умовах, у тому числі з використанням технологій дистанційного навчання та інтернет - ресурсів. Перелік навчально-методичних матеріалів разом з рекомендованою науковою та фаховою монографічною й періодичною літературою, необхідний для забезпечення самостійної роботи аспірантів, наведено у пункті 5. Здобувач освіти в ході самостійної роботи може:

- самостійно визначати рівень (глибину) опрацювання змісту матеріалу;
- самостійно опрацьовувати додаткові теми і питання;
- пропонувати свої варіанти організаційних форм самостійної роботи;
- використовувати для самостійної роботи методичні та навчальні посібники та інші інформаційні ресурси понад запропонованого переліку;
- здійснювати самоконтроль результатів самостійної роботи (власними методами або запропонованими викладачем).

Навчальний матеріал дисципліни, передбачений для засвоєння аспірантами у процесі самостійної роботи, виноситься на підсумковий контроль разом із навчальним матеріалом, який було опрацьовано під час проведення навчальних занять. Загальна кількість годин самостійної роботи, яка надається аспіранту для засвоєння навчального матеріалу дисципліни, становить 75 годин.

3.1.1 Модуль ЛІ, ПІ. Введення в молекулярну оптику та спектроскопію. Основні типи молекулярних спектрів. Квантова механіка молекул. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. Коливальна та обертальна структура електронних смуг. Методи рішення рівняння Шредінгера для молекул в різних наближеннях. Молекула як гармонійний осцилятор. Теоретичне обчислення коливально-обертальних спектрів двоатомних молекул. Коливальна структура електронних смуг

3.1.1.1 Повчання

Розглядають наступні питання: Молекула як система взаємодіючих частинок. Поділ енергії молекули на складові. Квантово-механічна модель молекули. Рівняння Шредінгера для молекули. Наближення Борна-Оппенгеймера. Поділ енергії молекули на складові. Основні типи молекулярних спектрів. Двоатомні молекули. Рішення рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню та молекули водню.

Наявне навчально-методичне забезпечення:

1. Глушков О.В. Нові методи математичного моделювання в задачах конструктивної географії, гідрометеорології та екології. - Одеса: ТЕС. - 2014. - 405С.
2. Глушков О.В. Атом в електромагнітному полі. - Київ: КНТ, 2006.
3. Глушков О.В. Релятивістська квантова теорія. Квантова механіка атомних систем. - Одеса: Екологія, 2008.
4. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes. - Odessa: OSENU, 2015. - 164P.
5. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N. Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes. - Odessa: OSENU, 2015. - 130P.

3.1.1.2 Питання до самоперевірки

1. Молекула як жорсткий ротатор. ([1], стр.21-35)
2. Обертання і обертальна енергія двоатомних молекул. ([1], стр.41-47)
3. Рішення рівняння Шредінгера для жорсткого ротатора. ([2], стр.33-39)
4. Рівні енергії і спектр жорсткого ротатора. ([2], стр.41-45)
5. Нежорсткий ротатор. ([1], стр.53-58)
6. Молекула як гармонійний осцилятор. ([1], стр.58-65)
7. Гармонійні коливання двоатомних молекул. ([2], стр.46-49)
8. Рішення рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора. ([3], стр.22-37)
9. Рівні енергії і спектр гармонічного осцилятора. ([1], стр.71-85)
10. Порівняння теоретичних та експериментальних спектрів жорсткого ротатора і гармонічного осцилятора. ([3], стр.41-55)

3.1.2 Модуль Л2, П2. Динаміка та спектроскопія електронних станів молекули. Електронні стани і хімічний зв'язок в молекулах. Оптика і спектроскопія багатоатомних молекул. Електронні стани багатоатомних молекул Класифікація електронних станів молекули. Визначення молекулярних термів.

3.1.2.1 Повчання

Розглядають наступні питання: Класифікація електронних станів молекули. Зв'язки Гунда. Повний момент кількості руху електронів. Проекція повного орбітального моменту по осі двоатомної молекули. Мультиплетність станів. Класифікація електронних станів молекули. Взаємодія обертового руху з електронним рухом. Зв'язки Гунда.

Найважче навчально-методичне забезпечення:

1. Глушков О.В. Нові методи математичного моделювання в задачах конструктивної географії, гідрометеорології та екології. - Одеса: ТЕС. - 2014. - 405С.
2. Глушков О.В. Атом в електромагнітному полі. - Київ: КНТ, 2006.
3. Глушков О.В. Релятивістська квантова теорія. Квантова механіка атомних систем. - Одеса: Екологія, 2008.
4. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V. Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes. - Odessa: OSENU, 2015. - 164P.
5. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N. Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes. - Odessa: OSENU, 2015. - 130P.

3.1.2.2 Питання до самоперевірки

1. Властивості симетрії власних функцій молекул. ([1], стр.91-105)
2. Властивості симетрії електронної власної функції. ([1], стр.107-117)
3. Симетрія обертових власних функцій. ([2], стр.53-59)
4. Позитивні і негативні обертові рівні. ([2], стр.59-65)
5. Симетричні і антисиметричні обертові рівні для молекул, що мають однакові ядра. ([1], стр.119-125)
6. Типи електронних переходів. ([1], стр.128-135)
7. Принципи побудованій електронних конфігурацій. ([2], стр.67-77)
8. Визначення електронних станів з роз'єднаних атомів. ([3], стр.22-37)
9. Визначення молекулярних термів з станів об'єднаного атома. ([1], стр.137-145)
10. Визначення різноманіття термів по електронній конфігурації. ([3], стр.58-63)

3.2. Рекомендований перелік додаткових теоретичних питань для самостійного вивчення

| № з/п | Назва теоретичного питання | З переліку додаткової літератури |
|----------|--|--|
| 1. | Елементи симетрії і точкові групи симетрії молекул. Форма і розміри багатоатомних молекул. | ([1] стр.21-35) |
| 2. | Симетрія молекул і основи теорії груп. Точкові групи нижчої, середньої і вищої симетрії. | ([4] стр.41-47) |
| 3. | Обертання багатоатомних молекул. Обертальні спектри лінійних молекул. | ([8], стр.33-39) |
| 4. | Молекули типу сферичного дзиги. Молекули типу симетричної і асиметричної дзиги. | ([2], стр.41-45) |
| 5. | Ефект Штарка для молекулярних систем. | ([11], стр.53-58) |
| 6. | Коливальні спектри багатоатомних молекул. Нормальні коливання багатоатомних молекул. | ([12], стр.58-65) |
| 7. | Класифікація нормальних коливань багатоатомних молекул по їх формі. -Класичне рішення задачі про малі коливання багатоатомних молекул. | ([2], стр.46-49) |
| 8. | Квантовомеханічне розв'язання коливальної задачі. | ([3], стр.22-37) |
| 9. | Загальні принципи класифікації коливань по їх симетрії. | ([5], стр.70-81) |
| 10. | Рішення завдання про коливання молекул при обліку властивостей симетрії. | ([7], стр.41-55) |
| 11. | Типові коливання багатоатомних молекул. Поняття про характеристичності частот коливань молекулярних фрагментів. | ([10], стр.53-58) |
| 12. | Структурний молекулярний аналіз по інфрачервоному спектрі поглинання. | ([11], стр.58-65) |
| 13. | Ідентифікація органічних сполук по ІК-Фур'є спектрами. | ([9], стр.46-49) |
| 14. | Електронні стани багатоатомних молекул. | ([10], стр.22-37) |
| 15. | Електронні стани та хімічний зв'язок в багатоатомних молекулах. | ([11], стр.71-85) |
| 16. | Електронні спектри поглинання багатоатомних молекул. | ([8], стр.45-51) |
| 17. | Застосування електронних спектрів поглинання. Кількісний аналіз двокомпонентної системи за електронними спектрами поглинання | ([10], стр.69-83) |
| 18. | Спектрофотометричний метод визначення складу комплексних сполук в розчинах по електронним спектрам поглинання багатоатомних молекул | ([13], стр.5-12) |

3.3. Вказівки з виконання курсової (дослідницької) роботи

Окремою складовою самостійної роботи з дисципліни «Обчислювальні методи оптики та динаміки квантових та лазерних систем» є виконання курсової (дослідницької) роботи та підготовка до її захисту. Курсова робота - один із видів індивідуальних завдань навчально-дослідницького та творчого характеру, який має на меті не лише поглиблення, узагальнення і закріплення знань аспірантів з навчальної дисципліни, а й застосування їх при проведенні власного наукового дослідження і вироблення вміння самостійно працювати з навчальною і науковою літературою, електронно-обчислювальною технікою та іншим обладнанням, використовуючи сучасні інформаційні засоби та технології.

Вибір теми курсової роботи (проекту) здобувач освіти здійснює на початку вивчення дисципліни протягом перших трьох тижнів семестру. Аспіранту надається право вільного вибору теми роботи із запропонованого переліку. також він може запропонувати власну тему курсової роботи за умови письмового погодження із науковим керівником, обґрунтувавши своє рішення належним чином і враховуючи, що запропонована тема повинна бути актуальною і відповідати професійному спрямуванню дисципліни.

Курсова робота є окремою заліковою одиницею навчальної дисципліни і оцінюється як самостійний вид навчальної діяльності аспіранта. Виконання курсової роботи передбачає розробку розрахунково-пояснювальної записки, графічного, ілюстративного матеріалу, та є

творчим рішенням конкретної задачі щодо застосування чисельних методів алгебри у розв'язанні задач динаміки квантових систем, виконаним аспірантом самостійно згідно із завданням під керівництвом викладача, на основі набутих з даної та суміжних дисциплін знань та умінь.

Процес написання курсової роботи включає послідовність певних етапів, які проходить здобувач вищої освіти самостійно і під керівництвом викладача: складання календарного плану; підбір, вивчення та аналіз літератури з досліджуваної теми; написання тексту теоретичної частини курсової роботи; аналіз експериментального матеріалу та узагальнення практичних досліджень; аналіз отриманих результатів, їх інтерпретація та формулювання висновків; оформлення тексту курсової роботи і підготовка до захисту, у тому числі отримання рецензії на курсову роботу.

Термін подання завершеної курсової роботи – не пізніше ніж за два тижні до захисту. Захист курсових робіт (проектів) відбувається до початку екзаменаційної сесії.

3.3.1. Перелік тем курсових (дослідницьких) робіт

| № з/п | Назва теми | |
|-------|---|------------------|
| 1. | Рівняння Шредінгера для молекули. Наближення Борна-Оппенгеймера. | ([2], стр.41-45) |
| 2. | Рішення рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню та молекули водню. | ([5], стр.53-58) |
| 3. | Рішення рівняння Шредінгера для жорсткого ротатора. | ([5], стр.58-65) |
| 4. | Рішення рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора. | ([2], стр.46-49) |
| 5. | Молекула як ангармонічного осцилятор. Крива потенційної енергії реальної молекули. Власні функції і правила відбору для ангармонічного осцилятора. Функція Морзе. | ([3], стр.22-37) |
| 6. | Молекула як коливається ротатор. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекули. | ([5], стр.70-81) |
| 7. | Визначення обертельних постійних двоатомних молекул. | ([4], стр.40-68) |
| 8. | Електронні переходи двоатомних молекул. Коливальна структура електронних смуг. | ([1], стр.71-85) |
| 9. | Розподіл інтенсивності в електронно-коливальних спектрах. Принцип Франка-Кондона. | ([1], стр.35-62) |
| 10. | Визначення молекулярних постійних по електронним спектрам поглинання молекул. | ([5], стр.46-49) |
| 11. | Обертальна структура електронних смуг. Обертальна структура електронного переходу. | ([1], стр.22-37) |
| 12. | Метод валентних зв'язків. Види хімічного зв'язку в молекулах. | ([5], стр.45-51) |
| 13. | Метод молекулярних орбіталей. Види хімічного зв'язку в молекулах. | ([1], стр.69-83) |
| 14. | Електронні спектри поглинання багатоатомних молекул. | ([3] стр.21-35) |
| 15. | Методи теорії збурень в обчисленні електронних термів молекул. | ([4] стр.41-47) |
| 16. | Метод функцій Гріна в обчисленні двоатомних молекул. | ([3], стр.33-39) |

Захист курсової роботи проводиться перед комісією, яка складається з двох викладачів кафедри, та за участю керівника курсової роботи. Перед допуском до захисту аспіранта текст електронної версії курсової роботи обов'язково перевіряється на оригінальність за допомогою доступного веб-сервісу перевірки із встановленням частки (відсоткового показника) оригінального тексту.

Для курсової роботи рекомендуються наступні показники оригінальності:

- понад 85 % – текст вважається оригінальним;
- від 75 до 85 % – оригінальність задовільна;
- від 60 до 75 % – матеріал може бути прийнятий до розгляду після доопрацювання та перевірки наявності посилань для цитованих фрагментів;
- менше 60 % – матеріал до розгляду не приймається.

Оцінка за виконання та захист курсової (дослідницької) роботи визначається відповідно до методики, викладеної у пункті 4.

4. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ КОНТРОЛЬНИХ ЗАХОДІВ ТА ОЦІНЮВАННЯ ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ

4.1. Політика навчальної дисципліни

| | |
|--|--|
| Загальна політика | <ul style="list-style-type: none"> • здобувач освіти зобов'язаний: відвідувати аудиторні заняття згідно розкладу, не спізнюватися; на заняттях дотримуватися етики поведінки, на лекціях бажано виключати телефони; своєчасно виконувати всі види робіт, передбачені програмою навчальної дисципліни; • під час практичних занять здобувач освіти має можливість використовувати власні цифрові носії інформації із доступом в мережу Інтернет, а також здійснювати пошук інформації на гугл-диску викладача з його дозволу; • здобувач освіти має право отримати від викладача вичерпну інформацію щодо оцінювання його роботи, у тому числі оцінки за усну або письмову відповідь під час контрольних заходів; • на останньому занятті з дисципліни викладач повідомляє загальну суму балів, яку здобувач освіти отримав за результатами всіх видів поточного контролю, що обчислюється як накопичувальна сума складових поточного контролю; викладач заздалегідь доводить до відома здобувачів освіти час об'яви результатів підсумкового контролю; • теми, які виносяться на самостійне опрацювання і не входять до тем аудиторних навчальних занять, оцінюються під час підсумкового контролю; • вивчення дисципліни з використанням технологій дистанційного навчання передбачено у випадку форс мажорних обставин, а також у разі інклюзивного навчання здобувачів освіти з вадами опорно рухового апарату; • підсумковий семестровий контроль здобувачів освіти може здійснюватися з використанням технологій дистанційного навчання – системи е-навчання університету; • з метою контролю виконання завдань заліку в дистанційній формі викладач має право протягом усього заходу користуватись засобами інформаційно-комунікаційного зв'язку, які дозволяють ідентифікувати здобувача освіти (Zoom, Google Meet, Skype, Viber тощо). |
| Правила стосовно зарахування пропущених занять | <ul style="list-style-type: none"> • допускається вільне відвідування аспірантами лекційних занять, відвідування практичних занять є обов'язковим; • ліквідація заборгованості з практичної частини навчальної дисципліни здійснюється за графіком, який оприлюднюється протягом двох робочих днів після закінчення занять у семестрі; • ліквідація заборгованості протягом заліково-екзаменаційної сесії дає можливість отримати допуск до семестрового контролю. |
| Правила щодо порушення термінів | <ul style="list-style-type: none"> • роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин, оцінюються на нижчу оцінку; • якщо обов'язкові заходи, які підлягають контролю, виконуються здобувачем освіти після строків, визначених у програмі навчальної дисципліни, кількість балів, що може отримати студент, не може перевищувати 60% від максимально можливої для цієї форми контролю. |
| Політика щодо призначення заохочувальних та штрафних балів | <ul style="list-style-type: none"> • здобувачам освіти можуть нараховуватися: • <i>заохочувальні (додаткові) бали:</i> «+0,5 бали» - за доповнення до виступу, суттєві запитання до доповідачів, вміння аргументовано висловлювати свої думки, творче опрацювали всіх питань лекції та зразкове ведення опорного конспекту; «+1 бал» - за підготовку творчої роботи (завдання, презентації); • <i>штрафні бали:</i> «-1 бал» - за пропуск практичного заняття. «-0,5 бали» - за невчасну здачу |

| | |
|---|--|
| | звіту практичної роботи (етапу курсової роботи); <ul style="list-style-type: none"> • мінімальна оцінка виконання змістового модуля після зниження не може бути нижча 60% від максимально можливої. |
| Політика щодо академічної доброчесності | <ul style="list-style-type: none"> • оцінювання усних відповідей, практичних робіт, самостійної роботи, результатів виконання тестових завдань та ін. здійснюється з позицій дотримання академічної доброчесності; • усі письмові роботи перевіряються на наявність плагіату і допускаються до захисту із коректними текстовими запозиченнями не більше 25%; • під час семестрового контролю здобувачу освіти дозволяється користуватись довідниками та іншими джерелами інформації, перелік яких встановлюється викладачем; використання носіїв інформації, що не передбачені встановленим переліком, а також спілкування з іншими особами, у тому числі й за допомогою технічних засобів зв'язку, є підставою для виставлення здобувачу освіти у відомості оцінки «не зараховано» (FX, F); • списування під час проведення контрольних заходів, у тому числі за допомогою мобільних пристроїв, заборонено. |

4.2. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання

4.2.1. Види контролю

Контрольні заходи з навчальної дисципліни «Обчислювальні методи оптики та динаміки квантових та лазерних систем» включають поточний та підсумковий контроль.

1. Поточний контроль здійснюється протягом семестру і включає:

- Усне опитування під час практичних занять на початку заняття з метою з'ясування рівня готовності здобувачів освіти до виконання завдань практичної роботи;
- Спостереження за роботою протягом заняття з подальшою оцінкою активності здобувачів освіти у процесі заняття, внесених ними пропозицій, оригінальних рішень, уточнень і визначень, доповнень відповідей попередніх доповідачів і т.п.;
- Письмове опитування після виконання завдань практичної роботи шляхом розв'язання проблемних питань письмово, розроблених у декількох варіантах (відповіді на проблемні питання можна включити в звіт про виконання роботи замість висновків);
- Перевірка індивідуальних звітів з виконаної роботи;
- Модульну контрольну роботу, яка включає 10 тестових запитань відкритого типу.

Правильна відповідь на кожне з запропонованих запитань оцінюється у 2 бали. Таким чином, максимальна оцінка за модульну контрольну роботу складає 20 балів.

- Поточний контроль виконання етапів курсової роботи.

2. Підсумковий контроль проводиться у формі семестрового заліку.

Умови допуску до підсумкового семестрового контролю:

- здобувач освіти вважається допущеним до семестрового контролю з навчальної дисципліни (семестрового заліку), якщо він виконав всі види робіт, передбачених програмою навчальної дисципліни, і набрав необхідну суму балів по заходах поточного контролю згідно з Положенням про проведення підсумкового контролю знань студентів: на останній день семестру інтегральна сума балів поточного контролю є достатньою (не менше 20 балів з теоретичної та не менше 30 балів з практичної частини у тому числі успішний захист курсової роботи) для отримання позитивної оцінки; інтегральна кількісна оцінка поточної роботи здобувача освіти обов'язково містить оцінку залікової контрольної роботи; сума балів на заліковій контрольній роботі не менше 50% від максимально можливої.

Інтегральна оцінка (%) поточної роботи здобувача освіти по дисципліні (шкала університету) розраховується за виразом:

$$B = 0,75 \times OZ + 0,25 \times OKP,$$

де OZ – оцінка роботи студента за змістовними модулями, бали;

OKP – оцінка залікової контрольної роботи, бали.

4.3. Оцінювання результатів навчання (кількість балів, які можуть отримати здобувачі вищої освіти)

4.3.1. ЗМ-Л1, ЗМ-Л2

Оцінювання лекційних змістових блоків здійснюється на підставі результатів модульних контрольних робіт, які проводяться в кінці освоєння змістових блоків ЗМ-Л1, ЗМ-Л2.

| Кількість балів | Змістові блоки | | Сума балів |
|-----------------|----------------|-------|------------|
| | ЗМ-Л1 | ЗМ-Л2 | |
| Max | 20 | 20 | 40 балів |
| Min | 0 | 0 | 0 балів |

4.3.2. ЗМ-П1, ЗМ-П2

Оцінювання практичних змістових блоків здійснюється на підставі результатів модульних контрольних робіт, які проводяться в кінці освоєння змістових блоків ЗМ-П1, ЗМ-П2, ЗМ-КуР.

| Кількість балів | Змістові блоки | | Сума балів |
|-----------------|----------------|-------|------------|
| | ЗМ-П1 | ЗМ-П2 | |
| Max | 20 | 20 | 40 балів |
| Min | 0 | 0 | 0 балів |

Оцінюванню під час поточного контролю підлягають всі практичні заняття, передбачені програмою навчальної дисципліни. Критерії оцінки практичних робіт: повнота і своєчасність виконання завдання, акуратність розрахунків.

Виконання практичної роботи оцінюється викладачем з урахуванням активності здобувача освіти на практичному занятті (під час обговорення загальної проблеми, розв'язування завдань) та за результатами перевірки виконання завдань на самостійну роботу.

Матеріал для самостійної роботи, який передбачений в темі практичного заняття, оцінюється одночасно із аудиторною роботою під час поточного контролю теми на відповідному практичному занятті.

4.3.3. ЗМ-КуР

| Кількість балів | Оцінка виконання етапів курсової роботи протягом семестру* | Оцінка захисту курсового проекту** | Сума балів |
|-----------------|--|------------------------------------|------------|
| Max | 12 | 8 | 20 балів |
| Min | 0 | 0 | 0 балів |

Примітки: * - оцінюється розкриття змісту та оформлення курсової роботи; ** - оцінюється вміння чітко, зрозуміло та стисло викладати основні результати проведеного дослідження; повнота, глибина, обґрунтованість відповідей на питання членів комісії за змістом роботи; ґрунтовність висновків та рекомендацій щодо практичного використання результатів дослідження.

Підсумкова оцінка виконання змістового модулю з курсової роботи складається з двох частин, на кожну з яких надається відповідна частка балів змістового модулю: оцінка виконання етапів курсової роботи протягом семестру - 60% балів (перша частина); оцінка захисту курсового проекту - щонайбільше 40% балів (друга частина). Критерії оцінки курсової роботи: креативність та оригінальність рішення, відмінність від наявних робіт, акуратність розрахунків, демонстрація презентабельності та комунікативності на захисті.

Курсова робота оцінюється у балах і відсотках і зараховується до загальної оцінки з дисципліни.

4.3.4. Оцінка роботи здобувача освіти за всіма змістовими модулями (ОЗ)

Максимально можлива загальна кількість балів за шкалою університету, яку може отримати здобувач освіти за виконання обов'язкових форм контролю самостійної роботи, має становити 100%. При визначенні оцінки роботи здобувача освіти беруться до уваги: рівень теоретичної підготовки, вміння творчо застосовувати одержані знання для вирішення практичних завдань; вміння здійснювати необхідні розрахунки та аналізувати інформацію; якість відповіді (обґрунтованість, чіткість, стислість), здатність впевнено та правильно відповідати на теоретичні питання і пояснювати практичні дії, спроможність логічно будувати свій виступ (відповідь), аргументовано відстоювати особисту точку зору; вміння використовувати для обґрунтування своїх рішень останні досягнення науки і техніки; оволодіння методичними навичками. Рекомендується визначити оцінку за результати виконаних робіт, що формують базові знання, вміння та навички, як 75% від максимально можливої.

| Змістові блоки | Максимальна кількість балів |
|----------------|-----------------------------|
| ЗМ-Л1 | 20 балів |
| ЗМ-Л2 | 20 балів |
| ЗМ-П1 | 20 балів |
| ЗМ-П2 | 20 балів |
| ЗМ-Кур | 20 балів |
| Всього: | 100 балів |

4.3.5. Оцінка залікової контрольної роботи (ОКР)

| Кількість балів за правильне виконання одного тестового завдання | | Кількість тестових завдань | Сума балів | |
|--|---|----------------------------|---|-----|
| Max | 5 | 20 | Max | 100 |
| | | | Сума балів, за якої залікова контрольна робота вважається виконаною** | ≥50 |
| Min* | 0 | | Min | 0 |

Примітки:

* - нерозбірливо написана, невірна відповідь, її відсутність – 0 балів;

** - сума балів, за якої залікова контрольна робота вважається виконаною, повинна складати не менше 50% від максимально можливої суми балів на заліковій контрольній роботі.

Залікова контрольна робота проводиться у письмовій формі за тестами оцінки знань базової компоненти навчальної дисципліни, які розроблені кафедрою для проведення ректорського контролю залишкових знань здобувачів освіти або підсумкового контролю комісією. Залікова контрольна робота включає 20 тестових запитань відкритого типу. Правильна відповідь на кожне з запропонованих запитань оцінюється у 5 балів. Таким чином, максимальна оцінка за модульну контрольну роботу складає 100 балів.

Методика розробки тестових завдань викладена в додатку «Форми та принципи конструювання тестових завдань» Інструкції про Порядок проведення та критерії оцінювання відповідей студентів під час письмових іспитів.

4.4. Критерії оцінювання засвоєння навчальної дисципліни

| Оцінка | | |
|--|-------------------|-------------------------|
| Шкала університету (%) $V = 0,75 \times OЗ + 0,25 \times ОКР$ | За шкалою ЄКТС | За 2- бальною шкалою |
| 90-100 | A | «зараховано» |
| 82-89,9 | B | |
| 74-81,9 | C | |
| 64-73,9 | D | |
| 60-63,9 | E | |
| 35-59,9 | FX | «не зараховано» |
| 01-34,9 | F | |

Оцінювання семестрового заліку здійснюється у кількісній та якісній шкалах. Кількісна оцінка (бал успішності) – це відсоток, який становить інтегральна сума балів, отриманих здобувачем освіти на поточних контрольних заходах, відносно максимально можливої суми – 100 балів. Якісна оцінка – це оцінка, яка виставляється на підставі кількісної оцінки (балу успішності) за будь-якою якісною шкалою.

Результати складання заліку оцінюються за шкалою університету (%), за шкалою ЄКТС (A, B, C, D, E, F, FX), а також за двобальною шкалою («зараховано, «не зараховано»).

Процедура проведення семестрового заліку, не передбачає присутність здобувача освіти.

Проведення семестрового заліку полягає в оцінюванні засвоєння здобувачем освіти навчального матеріалу (вмін та навичок) на підставі інтегральної кількісної оцінки результатів виконання ним видів поточних контрольних заходів та залікової контрольної роботи

Критеріями складання здобувачами освіти заліку є:

- оцінка «зараховано» за 2-бальною шкалою;
- оцінки A, B, C, D, E за шкалою ЄКТС;
- інтегральна оцінка (%) поточної роботи здобувача освіти по дисципліні (шкала університету) $V \geq 60\%$.

Максимальна інтегральна оцінка роботи здобувача освіти протягом семестру має дорівнювати 100%, якщо він на обов'язкових та необов'язкових заходах контролю по усіх змістових модулях отримав сумарно оцінку 100% від максимально можливої і більше.

4.5. ПИТАННЯ ДО ЗАХОДІВ ПОТОЧНОГО, ПІДСУМКОВОГО ТА СЕМЕСТРОВОГО КОНТРОЛЮ

4.5.1. Тестові завдання до модульної контрольної роботи модуля ЗМ-Л1.

1. Молекула як ангармонічний осцилятор. ([1], стр.22-32)
2. Крива потенційної енергії реальної молекули. ([1], стр.34-37)
3. Власні функції і правила відбору для ангармонічного осцилятора. ([2], стр.23-30)
4. Суцільний спектр термів і дисоціація молекул. ([2], стр.31-41)
5. Функція Морзе. ([1], стр.43-48)
6. Спектри комбінаційного розсіювання світла. ([1], стр.49-55)
7. Комбінаційне розсіювання світла. ([2], стр.45-48)
8. Коливальний і обертальний спектри КР. ([3], стр.22-37)
9. Інтенсивності ліній в КР-спектрі. ([1], стр.55-65)
10. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. R- і P-гілки обертальної структури коливального спектра. ([3], стр.41-55)
11. Ізотопічний ефект в спектрах двоатомних молекул. ([1], стр.71-75)
12. Визначення обертальних постійних і міжатомних відстаней двухатомних молекул по ІК-Фур'є спектрами поглинання. ([1], стр.81-87)
13. Розподіл інтенсивностей ліній в коливально-обертальних спектрах. ([2], стр.49-52)
14. Залежність інтенсивності спектральних ліній від розподілу молекул по енергетичним станам. ([2], стр.53-55)
15. Відносна заселеність коливальних рівнів енергії. ([1], стр.88-93)
16. Відносна заселеність обертальних рівнів енергії. ([1], стр.95-99)
17. Коливальна структура електронних смуг. ([2], стр.56-59)
18. Електронні переходи двоатомних молекул. ([3], стр.22-37)
19. Коливальна структура електронних смуг. ([1], стр.101-108)
20. Розподіл інтенсивності в електронно-коливальних спектрах. ([3], стр.41-55)

4.5.2. Тестові завдання до модульної контрольної роботи модуля ЗМ-П1.

1. Принцип Франка-Кондона. ([1], стр.71-75)
2. Визначення молекулярних постійних по електронним спектрам поглинання молекул. ([1], стр.81-87)
3. Обертальна структура електронних смуг. ([2], стр.49-52)
4. Обертальна структура електронного переходу. ([2], стр.53-55)
5. Освіта канта. ([1], стр.22-32)
6. Відтінення смуг. ([1], стр.34-37)
7. Діаграма Фортрей. ([2], стр.23-30)
8. Комбінаційні співвідношення. ([2], стр.31-41)
9. Визначення обертальних постійних. ([1], стр.43-48)
10. Молекула як система взаємодіючих частинок. ([1], стр.49-55)
11. Поділ енергії молекули на складові. ([3], стр.22-37)
12. Квантово-механічна модель молекули. ([1], стр.101-108)
13. Рівняння Шредінгера для молекули. ([3], стр.41-55)
14. Наближення Борна-Оппенгеймера. ([3], стр.47-75)
15. Поділ енергії молекули на складові. ([2], стр.49-52)
16. Основні типи молекулярних спектрів. ([2], стр.53-55)
17. Двоатомні молекули. ([1], стр.88-93)
18. Рішення рівняння Шредінгера для молекулярного іону водню та молекули водню. ([2], стр.45-48)
19. Молекула як жорсткий ротатор. ([3], стр.22-37)
20. Обертання і обертальна енергія двоатомних молекул. ([1], стр.55-65)

4.5.3. Тестові завдання до модульної контрольної роботи модуля ЗМ-Л2.

1. Електронні стани і хімічний зв'язок в молекулах. ([3], стр.21-33)
2. Метод валентних зв'язків. ([1], стр.37-45)
3. Метод молекулярних орбіталей. ([1], стр.57-67)
4. Види хімічного зв'язку в молекулах. ([2], стр.33-49)
5. Два основних наближених методу розрахунку хімічних зв'язків. ([1], стр.68-71)
6. Багатоатомні молекули. ([1], стр.78-81)
7. Елементи симетрії і точкові групи симетрії молекул. ([2], стр.67-77)
8. Форма і розміри багатоатомних молекул. ([4], стр.22-37)
9. Симетрія молекул і основи теорії груп. ([1], стр.87-93)
10. Точкові групи нижчої, середньої і вищої симетрії. ([4], стр.58-63)
11. Загальні висновки про симетрії молекул. ([1], стр.98-105)
12. Обертання багатоатомних молекул. ([2], стр.78-97)
13. Обертальні спектри лінійних молекул. ([3], стр.21-36)
14. Ефект Штарка. ([1], стр.117-125)
15. Коливальні спектри багатоатомних молекул. ([1], стр.127-131)
16. Нормальні коливання багатоатомних молекул. ([2], стр.103-109)
17. Класифікація нормальних коливань багатоатомних молекул по їх формі. ([2], стр.119-125)
18. Класичне рішення задачі про малі коливання багатоатомних молекул. ([1], стр.137-148)
19. Квантово-механічне рішення коливальної задачі. ([2], стр.127-135)
20. Загальні принципи класифікації коливань по їх симетрії. ([1], стр.150-167)

4.5.4. Тестові завдання до модульної контрольної роботи модуля ЗМ-П2.

1. Координати симетрії. ([1], стр.78-81)
2. Рішення завдання про коливання молекул при обліку властивостей симетрії. ([2], стр.67-77)
3. Типові коливання багатоатомних молекул. ([4], стр.22-37)
4. Поняття про характеристичності частот коливань молекулярних фрагментів. ([1], стр.87-93)
5. Характеристичні частоти ІК-поглинання основних класів сполук. ([4], стр.58-63)
6. Структурний молекулярний аналіз по інфрачервоному спектру поглинання. ([3], стр.21-33)
7. Ідентифікація органічних сполук по ІК-Фур'є спектрам. ([5], стр.37-45)
8. Електронні стани багатоатомних молекул. ([1], стр.57-67)
9. Електронні стани та хімічний зв'язок в багатоатомних молекулах. ([2], стр.33-49)
10. Електронні спектри поглинання багатоатомних молекул. ([1], стр.127-131)
11. Класифікація електронних переходів. ([2], стр.103-109)
12. Застосування електронних спектрів поглинання. ([2], стр.119-125)
13. Кількісний аналіз двокомпонентної системи за електронними спектрами поглинання ([1], стр.137-148)
14. Спектрофотометричний метод визначення складу комплексних сполук в розчинах по електронним спектрам поглинання багатоатомних молекул ([2], стр.127-135)
15. Повний момент кількості руху електронів. ([2], стр.78-97)
16. Проекція повного орбітального моменту по осі двоатомних молекули. ([3], стр.21-36)
17. Мультиплетність станів. ([1], стр.117-125)
18. Класифікація електронних станів молекули. ([5], стр.150-167)
19. Взаємодія обертованого руху з електронним рухом. ([1], стр.68-71)
20. Зв'язки Гунда. ([1], стр.78-81)

4.5.5. Тестові завдання до залікової роботи.

1. Молекула як ангармонічний осцилятор. ([1], стр.22-32)
2. Крива потенційної енергії реальної молекули. ([1], стр.34-37)
3. Власні функції і правила відбору для ангармонічного осцилятора. ([2],стр.23-30)
4. Суцільний спектр термів і дисоціація молекул. ([2], стр.31-41)
5. Функція Морзе. ([1], стр.43-48)
6. Спектри комбінаційного розсіювання світла. ([1], стр.49-55)
7. Комбінаційне розсіювання світла. ([2], стр.45-48)
8. Коливальний і обертальний спектри КР. ([3], стр.22-37)
9. Інтенсивності ліній в КР-спектрі. ([1], стр.55-65)
10. Коливально-обертальні спектри двоатомних молекул. R- і P-гілки обертальної структури коливального спектра. ([3], стр.41-55)
11. Ізотопічний ефект в спектрах двоатомних молекул. ([1], стр.71-75)
12. Визначення обертальних постійних і міжатомних відстаней двухатомних молекул по ІК-Фур'є спектрами поглинання. ([1], стр.81-87)
13. Розподіл інтенсивностей ліній в колевально-обертальних спектрах. ([2],стр.49-52)
14. Залежність інтенсивності спектральних ліній від розподілу молекул по енергетичним станам. ([2], стр.53-55)
15. Відносна заселеність коливальних рівнів енергії. ([1], стр.88-93)
16. Відносна заселеність обертальних рівнів енергії. ([1], стр.95-99)
17. Коливальна структура електронних смуг. ([2], стр.56-59)
18. Електронні переходи двоатомних молекул. ([3], стр.22-37)
19. Коливальна структура електронних смуг. ([1], стр.101-108)
20. Розподіл інтенсивності в електронно-коливальних спектрах. ([3], стр.41-55)
21. Електронні стани і хімічний зв'язок в молекулах. ([3], стр.21-33)
22. Метод валентних зв'язків. ([1], стр.37-45)
23. Метод молекулярних орбіталей. ([1], стр.57-67)
24. Види хімічного зв'язку в молекулах. ([2], стр.33-49)
25. Два основних наближених методу розрахунку хімічних зв'язків. ([1], стр.68-71)
26. Багатоатомні молекули. ([1], стр.78-81)
27. Елементи симетрії і точкові групи симетрії молекул. ([2], стр.67-77)
28. Форма і розміри багатоатомних молекул. ([4], стр.22-37)
29. Симетрія молекул і основи теорії груп. ([1], стр.87-93)
30. Точкові групи нижчої, середньої і вищої симетрії. ([4], стр.58-63)
31. Загальні висновки про симетрії молекули. ([1], стр.98-105)
32. Обертання багатоатомних молекул. ([2], стр.78-97)
33. Обертальні спектри лінійних молекул. ([3], стр.21-36)
34. Ефект Штарка. ([1], стр.117-125)
35. Коливальні спектри багатоатомних молекул. ([1], стр.127-131)
36. Нормальні коливання багатоатомних молекул. ([2], стр.103-109)
37. Класифікація нормальних коливань багатоатомних молекул по їх формі. ([2], стр.119-125)
38. Класичне рішення задачі про малі коливання багатоатомних молекул. ([1], стр.137-148)
39. Квантово-механічне рішення коливальної задачі. ([2], стр.127-135)
40. Загальні принципи класифікації коливань по їх симетрії. ([1], стр.150-167)

5. СПИСОК ДЖЕРЕЛ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ

Основна література

1. Glushkov A.V., Relativistic Quantum Theory. Quantum, mechanics of Atomic Systems. Odessa: Astroprint, 2008.
2. Khetselius, O. Yu. Hyperfine structure of atomic spectra; Astroprint: Odessa, **2008**
3. Khetselius, O.Yu. Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems. Astroprint: Odessa, **2011**.
4. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Изд. 2-е. М.: УРСС, 2001.
5. Glushkov, A.V. Relativistic and correlation effects in spectra of atomic systems; Odessa: Astroprint: 2006.

Додаткова література

1. Glushkov A.V. Atom in electromagnetic field. KNT: Kiev, 2005.
2. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Radiation decay of atomic states: atomic residue polarization and gauge noninvariant contributions. Phys.Lett.A. 1992. Vol.170, N1. P.33-36; [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(92\)90387-2](https://doi.org/10.1016/0375-9601(92)90387-2)
3. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E., High Order Corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the Model Zeroth Approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions. Phys.Scripta. 1985.-Vol.32,N5.-P.513-522; <https://doi.org/10.1088/0031-8949/32/5/011>
4. [E.P.Ivanova](#), [A.V.Glushkov](#), Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences// [Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer](#).-1986.-Vol.36(2).-P. 127-145; [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(86\)90116-0](https://doi.org/10.1016/0022-4073(86)90116-0)
5. Glushkov A.V., Ivanov L.N., DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach. Journal of Physics B: Atomic, Mol. and Opt. Phys. 1993. Vol.26, N14. P.L379–386; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/26/14/001>
6. Khetselius, O.Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. Int. J. Quant. Chem. 2009, 109, 3330–3335.
7. Khetselius, O. Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes. Phys. Scripta 2009, 135, 014023.
8. Khetselius O.Yu., [Quantum Geometry: New approach to quantization of the quasistationary states of Dirac equation for super heavy ion and calculating hyper fine structure parameters](#). Proc. Intern. Geometry Center. 2012. Vol.5(3-4). P.39-45.
9. Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Svinarenko, A.A., Buyadzhi, V.V., Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions. TEC: Odessa, 2015.
10. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Methods of computational mathematics and mathematical physics. P.1. TES: Odessa, 2015.
11. Khetselius, O.Yu., Glushkov, A.V., Dubrovskaya, Yu.V., Chernyakova, Yu.G., Ignatenko, A.V., Serga, I.N., Vitavetskaya, L.A. Relativistic quantum chemistry and spectroscopy of exotic atomic systems with accounting for strong interaction effects. In: Wang YA, Thachuk M, Krems R, Maruani J (eds) Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics. Springer, Cham, 2018; Vol. 31, pp. 71-91;
12. Dubrovskaya, Y.V., Khetselius, O.Y., Vitavetskaya, L.A., Ternovsky, V.B., Serga, I.N., Quantum chemistry and spectroscopy of pionic atomic systems with accounting for relativistic, radiative, and strong interaction effects. Advances in Quantum Chem. 2019, Vol.78, pp 193-222.
13. Glushkov, A., Gurskaya, M., Ignatenko, A., Smirnov, A., Serga, I., Svinarenko, A., Ternovsky, E. Computational code in atomic and nuclear quantum optics: Advanced computing multiphoton resonance parameters for atoms in a strong laser field. J. Phys.: Conf. Ser. 2017, 905(1), 012004.

14. Khetselius OYu, Optimized relativistic many-body perturbation theory calculation of wavelengths and oscillator strengths for Li-like multicharged ions, *Adv Quant Chem.* 2019. vol 78. Elsevier, pp 223-251; <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.001>
15. Glushkov AV (2019) Multiphoton spectroscopy of atoms and nuclei in a laser field: Relativistic energy approach and radiation atomic lines moments method. *Adv Quant Chem.* vol 78. Elsevier, pp 253-285. <https://doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.004>
16. Glushkov, A. QED energy approach to atoms and nuclei in a strong laser field: Radiation lines. *AIP Conf. Proceedings.* 1290(1) (2010) 258-262. <http://doi.org/10.1063/1.3517569>
17. Glushkov, A., Gurskaya, M., Ignatenko, A., Smirnov, A., Serga, I., Svinarenko, A., Ternovsky, E. Computational code in atomic and nuclear quantum optics: Advanced computing multiphoton resonance parameters for atoms in a strong laser field. *J. Phys.: Conf. Ser.* 905 (2017) 012004.
18. Svinarenko, A. A., Glushkov, A. V., Khetselius, O.Yu., Ternovsky, V.B., Dubrovskaya, Yu., Kuznetsova, A.A., Buyadzhi, V.V., Theoretical spectroscopy of rare-earth elements: spectra and autoionization resonances. *Rare Earth Element*, Ed. J. Orjuela (InTech) 2017, pp 83-104. 52
19. Glushkov, A.V., Khetselius, O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi, V.V., Ternovsky, V.B., Kuznetsova, A., Bashkarev, P.G. Relativistic perturbation theory formalism to computing spectra and radiation characteristics: application to heavy element. *Recent Studies in Perturbation Theory*, ed. D. Uzunov (InTech) 2017, 131-150
20. Wilson S., *Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry*, Wiley, Chichester, (2007).
21. O.Y. Khetselius, A.V. Glushkov, S. M. Stepanenko, A. A. Svinarenko, V.V. Buyadzhi, Advanced Quantum-Kinetic Model of Energy Exchange in Atmospheric Molecule Mixtures and CO₂ Laser-Molecule Interaction. In: Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Maruani J., Brändas E. (Eds) *Advances in Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology*, Cham: Springer. 2021, Vol.33, P. 207-216.