

# СПЕКТРОСКОПИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Учебная программа учреждения высшего образования  
по учебной дисциплине для специальности  
1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий

**Введение в спектроскопию молекулярных и кристаллических структур.** Вопросы, решаемые молекулярной спектроскопией. Виды спектральных молекул. Обоснование видов спектров. Спектры вращательные, колебательные и электронные их области применения. Вероятности оптических переходов. Ширина линий. Соотношение неопределенности. Вероятностный метод расчета интенсивности линий

**Вращательные спектры изолированных молекул.** Вращение двухатомной и многоатомной молекулы. Переходы между вращательными уровнями для молекулы как жесткого волчка ИК и КР спектра вращений молекулы. Применение спектров. Вращение многоатомной молекулы как симметричного волчка. Вращательные ИК и спектры КР

**Колебательные спектры изолированных молекул и их комплексов.** Колебания двухатомной молекулы. Спектр молекулы. Гармоническое и ангармоническое приближение. Энергия диссоциации молекул.

**Многоатомная молекула и ее элементы симметрии.** Теоретико-групповое рассмотрение.

**Характеристические колебания молекул и их использование для характеристики комплексов.** Изменение колебаний при объединении молекул в комплекс (нанокластер). Использование характеристических частот для характеристики кластеров

**Электронно-колебательные спектры изолированных молекул и их нанокластеров.** Электронно-колебательные спектры двухатомной молекулы. Принцип Франка-Кондона для двухатомной молекулы. Обозначения электронных состояний.

**Химические связи в многоатомной молекуле.** Систематика электронных состояний многоатомной молекулы. Спектры сплошные, полосатые и дискретные. Типы и систематика электронных переходов в многоатомных молекулах. Электронные спектры красителей

**Получение нанокластеров при  $j$  - спектроскопии.** Электронно-колебательные спектры изолированных молекул и их нанокластеров. Влияние температуры на структуру спектров.

**Электронные спектры молекулярных кристаллов.** Объединение молекул в кристалл и появление кристаллических полос поглощения. Экситонные состояния в кристаллах. Экситоны Френкеля. Экситонные спектры поглощения. Влияние температуры на спектры поглощения. Поляризация полос поглощения. Эффект Давыдова. Анализ спектров электронного поглощения молекулярных кристаллов при различных температурах

**Электронные спектры нанокластеров на основе полупроводниковых кристаллов.** Электронные спектры поглощения полупроводников. Возникновение экситонных состояний. Экситон Ванье-Мотта. Спектры люминесценции полупроводниковых кри-

сталлов. Квантовые состояния носителей заряда в полупроводниковых наночастицах на примере Cd/ZnS

### **Перечень основной литературы**

1. К. Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. Изд. "Мир".М, 1985
2. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. ИФМЛ, 1962
3. М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов. Колебания молекул. Изд. "Наука", М, 1972
4. Н.Б. Барковский, А.И. Комяк, Д.С. Умрейко. Симметричные представления в спектроскопии молекул. Минск, Изд. "Университетское", 1986
5. А.И. Комяк. Молекулярная спектроскопия. Мн., Изд. БГУ, 2005

### **Перечень дополнительной литературы**

1. А.А.Мальцев. Молекулярная спектроскопия. М. Изд. МГУ, 1980
2. Г.Герцберг. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М. Изд.-во Иностранная литература", 1949
3. К.Накамото. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. Изд -во "Мир". М., 1966