

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Физика межмолекулярных взаимодействий

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

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

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюзина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости.

ИПК-1.2. Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить математический аппарат теории межмолекулярного взаимодействия применительно к задачам оптики и спектроскопии.

– Научиться применять методы физики межмолекулярного взаимодействия к построению и анализу моделей физико-химических процессов в газовых средах и явлений, выработать навыки решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

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

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

Семестр 2, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для изучения и понимания материала данной дисциплины обучающийся должен владеть базовыми понятиями общей физики, ее разделов, связанных со взаимодействием излучения с веществом, оптикой, основами высшей математики.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 16 ч.;

– практические занятия: 16 ч.;

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Введение. Классификация межмолекулярных сил. Короткодействующие и дальнедействующие силы. Понятия электростатической, индукционной и дисперсионной энергий. Эффекты задержки взаимодействия. Магнитные эффекты

Тема 2. Общая теория далекодействующих межмолекулярных сил. Гамильтониан взаимодействия пары молекул. Мультипольные электрические моменты молекул. Связь мультипольных моментов молекулы с индуцированным ей потенциалом, напряженностью поля и его градиентами на взаимодействующей с ней молекулой

Тема 3. Связь электростатической энергии взаимодействия с мультипольными моментами

Тема 4. Молекулы во внешних однородных полях. Энергия молекулы и ее мультипольные моменты во внешнем однородном и неоднородном полях. Поляризуемости и высшие поляризуемости молекул. Определение электрических мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул через энергию молекулы во внешнем электрическом поле

Тема 5. Молекулы в нестационарных полях. Отклик молекулы на гармоническое осциллирующее поле. Комплексные мультипольные моменты и (высшие)поляризуемости.

Тема 6. Индукционная энергия и ее связь со статическими молекулярными поляризуемостями. Дисперсионная энергия и ее связь с динамическими поляризуемостями на мнимых частотах.

Тема 7. Дипольный момент взаимодействующих молекул. Приближение "constant ratio".

Тема 8. Поляризуемость взаимодействующих молекул.

Тема 9. Гиперполяризуемость взаимодействующих молекул.

Тема 10. Методы расчета мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул. Численный метод конечных разностей

Тема 11. Атомные комплексы. Энергия взаимодействия.

Тема 12. Атомные комплексы. Дипольный момент взаимодействующих молекул

Тема 13. Атомные комплексы. Поляризуемость взаимодействующих молекул

Тема 14. Атомно-молекулярные комплексы. Энергия и электрические свойства.

Тема 15. Молекулярные комплексы. Примеры расчета энергии взаимодействия и электрических свойств.

9. Текущий контроль по дисциплине

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

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

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

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

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»
- <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24778>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

в) План практических занятий по дисциплине.

Тема 1. Программа символьных вычислений MAPLE для расчетов электрических свойств молекулярных комплексов.

Тема 2. Функции дипольного момента атомарных комплексов.

Тема 3. Функции дипольного момента молекулярных комплексов

Тема 4. Функций поляризуемости молекулярных комплексов

Тема 5. Расчет функций поляризуемости атомарных комплексов

Тема 6. Расчет функций первой гиперполяризуемости атомарных комплексов.

Тема 7. Расчет функций первой гиперполяризуемости молекулярных комплексов

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Келих С. Молекулярная нелинейная оптика: Пер. с польск./ Под ред. И.Л. Фабелинского. - М.: гл. ред. физ.-мат. лит., 1981, 672 с.

2. Межмолекулярные взаимодействия: от двухатомных молекул до полимеров / Под. ред Б. Пюльмана. - М.: Мир, 1981, 592 с.

3. И.Г. Каплан. Межмолекулярные взаимодействия. физическая интерпретация компьютерные расчеты и модельные потенциалы. - М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015, 394 с.

б) дополнительная литература:

1. A.J. Stone. The Theory of intermolecular forces. - Oxford, 2002.

2. A Salam. Molecular quantum electrodynamics. Long-range Intermolecular Interactions. - 2010.

в) ресурсы сети Интернет:

1. Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)

2. Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)

3. Библиографическая база данных ISI Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)

4. Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)

5. Электронные версии специализированных научных журналов

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате, оснащенные системой («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ, заведующий кафедрой.