


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

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета

 С.Н. Филимонов

«15» апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины

Теоретические основы фотоники

по направлению подготовки
03.04.02 Физика

Профиль подготовки «**Фундаментальная и прикладная физика**»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2021

Код дисциплины в учебном плане: **Б1.В.ДВ.01.02.03**

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 О.Н. Чайковская

Председатель УМК

 О.М. Сюсина

Томск – 2021

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 – Способность 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 теоретические основы фотоники молекул, методов расчета физико-химических свойств органических молекул;

– Владеть навыками анализа, синтеза, оптимизации и прогнозирования качества исследования теоретических и экспериментальных моделей органических сред.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в профессиональный модуль по выбору «Физика атомов и молекул».

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

Семестр 1, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

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

Особенно важно для понимания данного курса знать основные понятия и методы решений уравнений математической физики в анализе физических явлений.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

– лекции: 24 ч.;

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Фотоника молекул. Схема электронных состояний и фотопроцессов в многоатомных молекулах. Времена жизни возбужденных состояний. Квантовые выходы фотопроцессов. Конкуренция фотофизических и фотохимических процессов.

Тема 2. Задачи вычислительного эксперимента при изучении фотоники молекул.

Тема 3. Влияние химического и пространственного строения на электронно-возбужденные состояния и спектры органических молекул.

Тема 4. Спин-орбитальное взаимодействие в многоатомных молекулах.

Тема 5. Физико-химические свойства органических молекул (ксантены).

Тема 6. Квантово-химическая модель фотолиза химических связей в органических соединениях

Тема 7. Перенос энергии электронного возбуждения в молекулах и молекулярных системах.

Тема 8. Реакции фотопереноса протона.

Тема 9. Процессы дезактивации электронно-возбужденных состояний ароматических и гетероароматических молекул в конденсированной фазе.

Тема 10. Релаксационные процессы в свободных молекулах в газовой фазе.

Тема 11. Применение квантовой химии в задачах прогнозирования новых активных сред лазеров на основе органических соединений.

Тема 12. Современные спектрально-люминесцентные способы изучения электронного строения многоатомных молекул в основном и возбужденных состояниях.

Тема 13. Фотоника и органическая электроника.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости (фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр), выполнения заданий. Посещение не менее 75 % лекций является основанием для допуска к зачету.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух основных вопросов и третьего, дополнительного вопроса. На основные вопросы учащийся дает развернутый ответ, на дополнительный – краткий. Продолжительность зачета 1,5 часа.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24800>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Перечень вопросов, выносимых на зачет:

ВОПРОСЫ К КОЛОКВИУМУ

1. Гамильтониан Борна-Оппенгеймера
2. Вариационный принцип
3. Метод Хартри-Фока
4. Теорема Купменса
5. Электронная корреляция
6. Молекулярные силы в газах и конденсированных средах
7. Модельные гамильтонианы

Темы для рефератов

- 1) Квантово-механическая теория переноса энергии
- 2) Фотофизические процессы в конденсированных углеводородах
- 3) Триplet-триpletный перенос энергии в бихромофорных молекулярных системах
- 4) Сверхбыстрые процессы конверсии в свободных молекулах в газовой фазе

5) Основные приемы аппроксимации межмолекулярных взаимодействий. Неэмпирические методы построения потенциалов. Полуэмпирические методы построения потенциалов

в) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к лекционным и практическим занятиям;
- подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;
- подготовку к зачету.

Методические рекомендации студентам по самостоятельной работе.

Вопросы, вынесенные на самостоятельное изучение.

- Процессы дезактивации электронно-возбужденных состояния ароматических и гетероароматических молекул в конденсированной фазе.
- Релаксационные процессы в свободных молекулах в газовой фазе
- Применение квантовой химии в задачах прогнозирования новых активных сред лазеров на основе органических соединений
- Современные спектрально-люминесцентные способы изучения электронного строения многоатомных молекул в основном и возбужденных состояниях
- Фотоника и органическая электроника
- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке лекционным занятиям;
- подготовка к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей. Л.: Наука, 1967. – 616 с.
2. Майер Г.В., Данилова В.И. Квантовая химия, строение и фотоника молекул. Томск: ТГУ, 1984. – 218 с.
3. Майер И. Избранные главы квантовой химии. Пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 384 с.
4. Майер Г.В. Фотофизические процессы и генерационная способность органических молекул. Томск: ТГУ, 1992. – 249 с.
5. Майер Г.В., Артюхов В.Я., Базыль О.К. и др. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений. Новосибирск: Наука, 1997. – 232 с.
6. Современная квантовая химия. Под ред. Бродского А.М. М.: Москва, 1968. – 320 с.
7. Симкин Б.Я., Шейхет И.И. Квантовохимическая и статистическая теория растворов. Вычислительные методы и их применение. М.: Химия, 1989. – 256 с.
8. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов– на-Дону: Феникс, 1997. – 560 с.

б) дополнительная литература:

1. Нурмухаметов Р.Н. Поглощение и люминесценция ароматических соединений. М.: Химия, 1971. - 216 с.
2. Китайгородский А.И., Зоркий П.М., Бельский В.К. Строение органического вещества. Данные структурных исследований. 1929-1970. М., 1980. - 648 с.
3. Китайгородский А.И., Зоркий П.М., Бельский В.К. Строение органического вещества.

- Данные структурных исследований. 1971-1973. М.: Наука, 1982. - 510 с.
4. Справочник химика. Т.1 / Под ред. Никольского Б.П., Л.: Химия, 1971. - 1071 с.
 5. Бахшиев Н.Г. Фотофизика диполь-дипольных взаимодействий: Процессы сольватации и комплексообразования. СПб.: Изд-во С.-Петерб. Ун-та, 2005. – 500 с.
 6. Давтян О.К. Квантовая химия. М.: Высшая школа, 1962. 560 с.
 7. Козман У. Введение в квантовую химию. – М.: ИЛ, 1960. – 560 с.

г) ресурсы сети Интернет:

- открытые онлайн-курсы по нелинейной оптике
- Журнал «Квантовая электроника» – <https://www.quantum-electron.ru>
- Журнал «Оптика и спектроскопия» – <https://journals.ioffe.ru/journals/5>
- Информационный бюллетень лазерной ассоциации «Лазер-информ»

<https://bibl.laser.nsc.ru/lazer-inform/>

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 OneNote, 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/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

- Scopus – <https://www.scopus.com/>
- Web of Science – <https://clarivate.com/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, 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.

15. Информация о разработчиках

Майер Георгий Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ.