


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 молекулярной спектроскопии

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Профиль подготовки:
«Фундаментальная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр


Год приема
2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.02.12

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:

- ОПК-2 – способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные;
- ПК-1 – готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований.

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. Задачи освоения дисциплины

- Освоить математический аппарат квантовой молекулярной спектроскопии и базовые модели описания молекулярных свойств.
- Научиться применять понятийный аппарат молекулярной спектроскопии для решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в профессиональный модуль по выбору «Оптика и спектроскопия»

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

Семестр 7, зачет.

Семестр 8, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

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

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: математический анализ, квантовая механика, теория симметрии.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

- лекции: 40 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 в молекулярную спектроскопию.

Предмет и объект исследования молекулярной спектроскопии. Типы спектров. Внутренняя и поступательная типы энергий молекул. Коэффициенты Эйнштейна. Закон Бугера-Ламберта-Бера.

Тема 2. Понятие спектральной линии и её ширины.

Параметры спектральной линии. Форма контура. Ширина линии. Механизмы уширения спектральных линий. Примеры извлечения ширины спектральной линии из экспериментального спектра.

Тема 3. Основы математического аппарата молекулярной спектроскопии.

Уравнение Шрёдингера. Постулаты квантовой механики. Свойства эрмитовых операторов. Матричное представление. Собственные значения и собственные вектора. Вариационный принцип. Разделение поступательного и молекулярных движений. Полный молекулярный гамильтониан. Приближение Борна-Оппенгеймера. Разбор понятия электронного состояния на примере молекулы кислорода.

Тема 4. Метод Хартри-Фока, атомные и молекулярные орбитали.

Ядерный и электронный спин. Принцип Паули. Спин-орбиталь. Слэтеровский детерминант. Метод Хартри-Фока. Атомные и молекулярные орбитали. Связанные и несвязанные орбитали. Сигма- и пи-связь. НОМО и LUMO орбитали. Гибридизация на примере молекул углеводородов.

Тема 5. Методы пост-Хартри-Фока и их реализация в известных программных пакетах.

Корреляционная энергия. Метод конфигурационного взаимодействия. Возбуждённые детерминанты. Теорема Бриллюэна. Согласованность размеров. Поправки Дейвидсона и Попла. Метод связанных кластеров. Методы теории возмущений Мёллера-Плессе. Мультиреференсные методы. Понятие базисного набора. Корреляционно-согласованные базисные наборы Даннинга. Пакеты программ по квантово-химическим методам и пример работы с ними.

Тема 6. Основы колебательного движения.

Определение колебательного движения. Типы колебательных движений. Молекулярно-фиксированная система координат. Внутренние координаты. Колебательная энергия. Кинетический оператор во внутренних координатах. Выражение внутренних координат через декартовы. G -матрица. Квантовый гармонический осциллятор во внутренних координатах.

Тема 7. Разделение колебательных и вращательных движений.

Условия Эккарта. Углы Эйлера. Системы координат Эккарта и главных моментов инерции. Примеры расчёта углов Эйлера для равновесной и деформированной конфигураций молекул.

Тема 8. Нормально-модовые координаты.

Определение нормальных (или нормально-модовых) координат и их свойства. Линеаризованные внутренние координаты. B , G и F – матрицы. Взаимосвязь внутренних и нормальных координат. Вывод нормальных координат на примере молекулы озона. Квантовый гармонический осциллятор многоатомной молекулы в нормально-модовых координатах. Примеры расчёта энергий колебательных уровней молекул в гармоническом приближении.

Тема 9. Ангармонизм.

Природа ангармонизма в колебательных движениях молекул. Учёт ангармонизма в рамках нормально-модовых координат. Связь нормальных координат с операторами рождения и уничтожения. Аналитические формулы расчёта матричных элементов операторов координаты и импульса в произвольной степени. Квадратурные формулы расчёта матричных элементов. Пример вариационного расчёта энергий колебательных уровней с учётом ангармонизма высокого порядка. Анализ влияния числа базисных функций на сходимость решения. Анализ волновых функций. Разбор понятия колебательного состояния.

Тема 10. Осциллятор Морзе.

Поверхность потенциальной энергии. Потенциал и осциллятор Морзе. Аналитические и численные формулы расчёта матричных элементов гамильтониана осциллятора Морзе. Связанные состояния. Разложение по степеням координаты Морзе. Пример вариационного решения уравнения Шрёдингера с потенциалом типа Морзе. Анализ скорости сходимости решения от числа базисных функций в сравнении с нормально-модовым подходом. Практическая работа по расчёту энергий колебательных уровней в рамках модели осциллятора Морзе.

Тема 11. Полный и вращательный угловые моменты молекулы.

Задание углов Эйлера. Определение углового момента. Полный и вращательный угловые моменты молекулы. Оператор вращательного углового момента. Взаимосвязь с углами Эйлера. Матрица направляющих косинусов. Коммутативные свойства операторов проекции вращательного углового момента и их матричные элементы. Понижающий и повышающий операторы.

Тема 12. Главные моменты инерции и классификация молекул на их основе.

Моменты инерции. Главные и центробежные моменты инерции молекулы. Типы соответствий молекулярных осей и осей главных моментов инерции. Классификация молекул по величине главных моментов инерции. Классическое выражение для вращательной энергии. Вращательный гамильтониан в приближении жёсткого волчка. Вращательные постоянные.

Тема 13. Симметричные и сферические волчки.

Сплюснутые и вытянутые симметричные волчки. Линейные многоатомные молекулы. Колебательный угловой момент. Сферический волчок. Практическая работа по расчёту энергий вращательных уровней в приближении жёсткого волчка.

Тема 14. Молекулы типа асимметричный волчок.

Асимметричный волчок. Параметр асимметричности. Взаимосвязь с симметричным волчком. Симметризованный вращательный базис. Матричные элементы гамильтониана асимметричного волчка.

Тема 15. Дипольные переходы.

Понятие электрического диполя. Полярные и неполярные молекулы. Сила линии. Моменты переходов. Разрешённые и запрещённые переходы. Правила отбора. Расчёт моментов переходов в нулевом приближении. Колебательный момент перехода.

Тема 16. Интенсивность спектральной линии.

Функция дипольного момента в нормальных координатах. Смысл производных функции дипольного момента. Вращательные переходы. Статистика Максвелла-Больцмана. Статистические суммы. Интенсивность спектральной линии. Практическая работа по расчёту интенсивностей колебательных переходов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения практических работ и тестов по лекционному материалу и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в первом семестре ставится по результатам текущего контроля по дисциплине.

Экзамен во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из трех частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа. Каждый билет содержит по два устных вопроса, проверяющих сформированность компетенций ОПК-2 и ПК-1, в соответствии с индикаторами усвоения компетенций ИОПК-2.2 и ИПК-1.1.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. В чём состоит предмет и объект молекулярной спектроскопии?
2. В чём отличие внутренней энергии молекулы от поступательной?
3. В каком случае достигается статистика Максвелла-Больцмана?
4. Каковы основные параметры спектральной линии и как их получают на практике?
5. Как закон Бугера-Ламберта-Бера применяется в молекулярной спектроскопии?
6. Какие типы уширения спектральных линий бывают и каким формам контура они соответствуют?
7. Какой физический смысл собственных значений и собственных векторов, получаемых из решения уравнения Шрёдингера?
8. Как приближение Борна-Оппенгеймера связано с понятием электронного состояния молекулы?
9. Почему метод Хартри-Фока является приближённым?
10. Как формируются молекулярные орбитали?
11. Как слэтеровский детерминант связан с принципом Паули?
12. Что такое корреляционная энергия?
13. В чём преимущества и недостатки методов конфигурационного взаимодействия?
14. Какие основные типы координат существуют для описания колебательного движения?
15. Для чего применяется условие Экарта?
16. В чём преимущество нормально-модовых координат?
17. Какова природа ангармонизма колебательных движений и как его учитывают на практике?
18. Каковы особенности модели квантового гармонического осциллятора?
19. Каковы преимущества модели осциллятора Морзе?
20. Как поступательные и внутренние движения молекулы разделяются между собой?
21. Как углы Эйлера взаимосвязаны с оператором вращательного углового момента?
22. Что такое главные моменты инерции и как классифицируются молекулы на их основе?
23. Как выглядит гамильтониан вращательной энергии в приближении жёсткого волчка?
24. Что такое сила линии?
25. Какие переходы являются разрешёнными, а какие запрещённые?
26. От чего зависит интенсивность спектральной линии?

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» ставится при условии выполнения всех практических заданий по текущему контролю и дачи правильных ответов по всем вопросам билета. Оценка «хорошо» ставится при условии выполнения всех практических заданий по текущему контролю и дачи правильного ответа хотя бы одному вопросу билета. Оценка «удовлетворительно» ставится при условии выполнения всех практических заданий по текущему контролю. Оценка «неудовлетворительно» ставится при условии невыполнения практических заданий по текущему контролю.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22001>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине размещены в электронном университете «Moodle».

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Bernath P.F. Spectra of Atoms and Molecules / NY: Oxford University Press.1995.400p.
- Bunker P.R., Jensen P. Fundamentals of Molecular Symmetry / London: IOP Publishing.2005.358p.
- Atkins P.W., Friedman R.S. Molecular Quantum Mechanics / PWA: Oxford.1996.545p.
- Papousek D., Aliev M.R. Molecular Vibrational-Rotational Spectra: Theory and Applications / NY: Elsevier.1982.323p.

б) дополнительная литература:

- Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия / М: Издательство «Мир».1981.451с.
- Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии / М.: «Мир».1985. 384с.

в) ресурсы сети Интернет:

- Информационная система SPECTRA: <https://spectra.iao.ru>
- Спектроскопическая база HITRAN: <https://hitran.org>

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

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

Никитин Андрей Владимирович, д-р физ.-мат. наук, Томский государственный университет, кафедра оптики и спектроскопии, профессор

Егоров Олег Викторович, канд. физ.-мат. наук, Томский государственный университет, кафедра оптики и спектроскопии, доцент