

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Физические свойства и динамика молекул БЗ.ДВ.6

Направление подготовки: 011200.62 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Фаткуллин Н.Ф. , Маклаков А.И.

Рецензент(ы):

Скирда В.Д.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Скирда В. Д.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__г

Регистрационный No 637314

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Фаткуллин Н.Ф.
Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики , Nail.Fatkullin@kpfu.ru ; Маклаков А.И.

1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины "Физические свойства и динамика молекул" является изучение основ физики молекул, их структурных, механических, магнитных и электрических свойств.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.ДВ.6 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина (Б3.ДВ.6) входит в вариативную (профильную) часть профессионального цикла (Б.3). Для освоения дисциплины необходимы знания основ таких дисциплин, как: основы математического анализа, методов математической физики, классической и квантовой механики, молекулярной физики и термодинамики.

Освоение дисциплины необходимо для изучения дисциплин, связанных с дисциплиной "Физические свойства и динамика молекул", и для успешной профессиональной деятельности.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук;
ОК-3 (общекультурные компетенции)	способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии (ОК-3);
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач;
ПК-10 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований (ПК-10).
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способность применять на практике базовые профессиональные навыки;
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин;
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-5);
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-6);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

2. должен уметь:

3. должен владеть:

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Демонстрировать понимание содержания курса, а также способность и готовность к дальнейшему обучению

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных(ые) единиц(ы) 216 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение, цель курса. История изучения молекул.	7	1-2	6	6	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Электрические моменты молекул. Магнитный момент молекулы, восприимчивость.	7	2-3	6	6	0	устный опрос
3.	Тема 3. Геометрические характеристики молекул.	7	3-4	7	7	0	устный опрос
4.	Тема 4. Внутреннее вращение в молекулах. Механические свойства молекул.	7	5-6	7	7	0	устный опрос
5.	Тема 5. Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход.	7	6-7	7	7	0	устный опрос
6.	Тема 6. Магнитные свойства молекул и их структура.	7	8-9	7	7	0	устный опрос
7.	Тема 7. Некоторые сведения из квантовой механики. Постулаты квантовой механики.	7	10-11	7	7	0	устный опрос
8.	Тема 8. Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул.	7	12-14	7	7	0	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	экзамен
	Итого			54	54	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение, цель курса. История изучения молекул.

лекционное занятие (6 часа(ов)):

Введение, цель курса. Определение молекулы, её устойчивость. История изучения молекул. Уравнения Максвелла, волновое уравнение, поляризованное излучение.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Уравнения Максвелла, волновое уравнение, поляризованное излучение.

Тема 2. Электрические моменты молекул. Магнитный момент молекулы, восприимчивость.

лекционное занятие (6 часа(ов)):

Электрические моменты молекул: монопольный, дипольный, квадрупольный. Индуцированный дипольный момент, поляризуемость молекулы. Магнитный дипольный момент; магнитный момент молекулы, восприимчивость. Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.

Тема 3. Геометрические характеристики молекул.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Геометрические характеристики молекул. Размеры молекул как шаров. Равновесная конфигурация молекулы, ядерный, скелет двух-, трех- и четырехатомных молекул. Ядерный скелет молекул углеводородов, насыщенных и ненасыщенных. Характеристики ядерного скелета: длина хим. связей, валентные углы, атомные радиусы. Пространственное строение молекул, молекулярный радиус. Модели молекул Стюарта-Бриггса. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Модели молекул Стюарта-Бриггса. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.

Тема 4. Внутреннее вращение в молекулах. Механические свойства молекул.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Внутреннее вращение в молекулах. Поворотная изомерия этана и 1,2-дихлорэтана. Поворотные изомеры углеводородов и полимеров, времена жизни изомеров. Механические свойства молекул. Динамика изолированной частицы, n частиц. Вращение n связанных частиц. Тензор момента инерции, классификация молекул по этому тензору. Внутренние колебания в молекулах. Гармонический осциллятор, двухатомная молекула. Уравнения Лагранжа, Обобщенные координаты. Колебания многоатомных молекул. Секулярное уравнение, нормальные колебания.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Уравнения Лагранжа, Обобщенные координаты. Колебания многоатомных молекул.

Тема 5. Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход. Энергия молекул во внешних полях. Уравнения Клаузиуса-Мосотти и Лорентц-Лоренца для неполярных молекул. Ориентационная (дипольная) поляризация. Уравнения Ланжевена-Дебая. Дипольные моменты, структура и внутреннее вращение. Закон аддитивности для дипольных моментов молекул. Молекула в переменном электрическом поле, её динамика. Уравнения Дебая, кривые поглощения и дисперсии. Представление Коула-Коула. Спектр времен релаксации. Соотношения Кронига-Краммерса. Время диэлектрической релаксации Дебая.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Спектр времен релаксации.

Тема 6. Магнитные свойства молекул и их структура.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Магнитные свойства молекул и их структура. Диамагнетики и парамагнетики. Диамагнетизм Ланжевена. Формула диамагнитной восприимчивости Ван-Флека. Магнето-химическая схема Паскаля и структура молекулы.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Магнето-химическая схема Паскаля и структура молекулы.

Тема 7. Некоторые сведения из квантовой механики. Постулаты квантовой механики.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Некоторые сведения из квантовой механики. Операторы, их свойств эрмитовы операторы, собственные значения и функции. Свойства эрмитовых операторов. Постулаты квантовой механики: замена физ. величин на операторы, уравнение Шредингера, стационарные состояния, суперпозицион. состояние, среднее значение наблюдаемой величины. Физ. смысл волновой функции. Матричные элементы операторов и их временная зависимость. Теория возмущений, зависящих от времени. Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: а) электрическое дипольное, б) магнитное дипольное, в) электрическое квадрупольное взаимодействия. Правила отбора. Модельные квантово-механические задачи: а) частица на окружности б) внутреннее вращение.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Физ. смысл волновой функции. Матричные элементы операторов и их временная зависимость.

Тема 8. Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул.

лекционное занятие (7 часа(ов)):

Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Свободно-сочлененная цепь, гибкость полимерной цепи. Цепь с фиксированным валентным углом. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул и тензор коэффициента самодиффузии.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул и тензор коэффициента самодиффузии.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение, цель курса. История изучения молекул.	7	1-2	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
2.	Тема 2. Электрические моменты молекул. Магнитный момент молекулы, восприимчивость.	7	2-3	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
3.	Тема 3. Геометрические характеристики молекул.	7	3-4	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
4.	Тема 4. Внутреннее вращение в молекулах. Механические свойства молекул.	7	5-6	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
5.	Тема 5. Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход.	7	6-7	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
6.	Тема 6. Магнитные свойства молекул и их структура.	7	8-9	подготовка к устному опросу	9	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
7.	Тема 7. Некоторые сведения из квантовой механики. Постулаты квантовой механики.	7	10-11	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
8.	Тема 8. Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул.	7	12-14	подготовка к устному опросу	9	устный опрос
	Итого				72	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Виды учебной работы: лекции

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение, цель курса. История изучения молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Введение, цель курса. Определение молекулы, её устойчивость. История изучения молекул. Уравнения Максвелла, волновое уравнение, поляризованное излучение.

Тема 2. Электрические моменты молекул. Магнитный момент молекулы, восприимчивость.

устный опрос , примерные вопросы:

Электрические моменты молекул: монопольный, дипольный, квадрупольный. Индуцированный дипольный момент, поляризуемость молекулы. Магнитный дипольный момент; магнитный момент молекулы, восприимчивость. Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.

Тема 3. Геометрические характеристики молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Геометрические характеристики молекул. Размеры молекул как шаров. Равновесная конфигурация молекулы, ядерный, скелет двух-, трех- и четырехатомных молекул. Ядерный скелет молекул углеводородов, насыщенных и ненасыщенных. Характеристики ядерного скелета: длина хим. связей, валентные углы, атомные радиусы. Пространственное строение молекул, молекулярный радиус. Модели молекул Стюарта-Бриггса. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.

Тема 4. Внутреннее вращение в молекулах. Механические свойства молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Внутреннее вращение в молекулах. Поворотная изомерия этана и 1,2-дихлорэтана. Поворотные изомеры углеводов и полимеров, времена жизни изомеров. Механические свойства молекул. Динамика изолированной частицы, n частиц. Вращение n связанных частиц. Тензор момента инерции, классификация молекул по этому тензору. Внутренние колебания в молекулах. Гармонический осциллятор, двухатомная молекула. Уравнения Лагранжа, Обобщенные координаты. Колебания многоатомных молекул. Секулярное уравнение, нормальные колебания.

Тема 5. Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход.

устный опрос , примерные вопросы:

Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход. Энергия молекул во внешних полях. Уравнения Клаузиуса-Мосотти и Лорентц-Лоренца для неполярных молекул. Ориентационная (дипольная) поляризация. Уравнения Ланжевена-Дебая. Дипольные моменты, структура и внутреннее вращение. Закон аддитивности для дипольных моментов молекул. Молекула в переменном электрическом поле, её динамика. Уравнения Дебая, кривые поглощения и дисперсии. Представление Коула-Коула. Спектр времен релаксации. Соотношения Кронига-Краммерса. Время диэлектрической релаксации Дебая.

Тема 6. Магнитные свойства молекул и их структура.

устный опрос , примерные вопросы:

Магнитные свойства молекул и их структура. Диамагнетики и парамагнетики. Диамагнетизм Ланжевена. Формула диамагнитной восприимчивости Ван-Флека. Магнето-химическая схема Паскаля и структура молекулы.

Тема 7. Некоторые сведения из квантовой механики. Постулаты квантовой механики.

устный опрос , примерные вопросы:

Некоторые сведения из квантовой механики. Операторы, их свойств эрмитовы операторы, собственные значения и функции. Свойства эрмитовых операторов. Постулаты квантовой механики: замена физ. величин на операторы, уравнение Шредингера, стационарные состояния, суперпозицион. состояние, среднее значение наблюдаемой величины. Физ. смысл волновой функции. Матричные элементы операторов и их временная зависимость. Теория возмущений, зависящих от времени. Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: а) электрическое дипольное, б) магнитное дипольное, в) электрическое квадрупольное взаимодействия. Правила отбора. Модельные квантово-механические задачи: а) частица на окружности б) внутреннее вращение.

Тема 8. Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул.

устный опрос , примерные вопросы:

Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Свободно-сочлененная цепь, гибкость полимерной цепи. Цепь с фиксированным валентным углом. Идеальная цепь как случайное блуждание. Самодиффузия молекул и тензор коэффициента самодиффузии.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Форма аттестации: экзамен

Распределение баллов по семинарам по дисциплине "Физические свойства и динамика молекул":

Тип занятий Баллы

1 Текущая работа 5

2 Семинары 40

3 Самостоятельные работы 5

4 Экзамен 50

Всего: 100 баллов

Билет 1

1.Электрические моменты молекул: монопольный, дипольный, квадрупольный.

2.Квантовомехан. задачи: частица на окружности.

Билет 2

1.Магнитный дипольный. момент; магнитный момент молекулы, магнитная восприимчивость.

2.Магнитные элементы операторов и их временная зависимость.

Билет 3

1.Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.

2.Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным из-лучением: магнитное дипольное взаимодействие.

Билет 4

1.Геометрические характеристики молекулы. Примеры.

2.Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: электрическое дипольное взаимодействие.

Билет 5

1.Внутреннее вращение в молекулах 1,2-дихлорэтана, УВ и полимеров.

2.Среднее значение наблюдаемой величины в квантовой механике.

Билет 6

1.Вращение связанных частиц. Тензор момента инерции, классификация молекул по тензору.

2.Теория возмущения, зависящего от времени.

Билет 7

1.Внутренние колебания многоатомных молекул. Секулярное уравнение, нормальные колебания.

2.Диамагнетизм Ланжевена. Магнето-химическая схема Паскаля и структура молекулы.

Билет 8

1.Ориентационная поляризация молекул, уравнения Ланжевена-Дебая.

2.Пространственное строение молекул, молекулярный радиус. Модели молекул. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.

Билет 9

1.Молекула в переменном электрическом поле. Уравнения Дебая, кривые поглощения и дисперсии.

2.Уравнение Шредингера, стационарные состояния.

Билет 10

1.Дипольные моменты молекул, связь со структурой и внутренним вращением. Закон аддитивности для дипольных моментов.

2.Эрмитовы операторы и их свойства.

7.1. Основная литература:

1.Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : Учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 2-е изд. (эл.). - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний. - 2012.-496 с. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150

- 2.Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / Каплан И.Г. пер. с англ. - Электронный ресурс. - 2012. - 394 стр. - ISBN: 978-5-9963-1385-3. Издательство "Бином. Лаборатория знаний".

Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8690

3.Высокомолекулярные соединения : Учебник / Кленин В.И., Федусенко И.В. - Издание 2-ое исправленное. - 2013. - 512 стр. - ISBN: 978-5-8114-1473-4. Издательство "Лань". - Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=5842

7.2. Дополнительная литература:

1. Курс общей физики : Учебное пособие. В 3-х тт. Т.3. Оптика. Физика атомов и молекул. Физика атомного ядра и микрочастиц. 6-е изд., стер. / Зисман Г.А., Тодес О.М. - Издательство "Лань", 2007. - 512 с. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=508
2. Специальные функции. Производные, интегралы, ряды и другие формулы. Справочник. / Брычков Ю.А. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. - 512 с. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=48182

7.3. Интернет-ресурсы:

Волновая теория механики атомов и молекул. Э. Шредингер. - <http://ufn.ru/ru/articles/1927/3/c/>
Лекции по квантовой химии. Уфимское квантовохимическое общество - <http://www.qchem.ru/lectures/>
Основы химии. Интернет-учебник. - <http://www.hemi.nsu.ru/index.htm>
Физическая энциклопедия. Молекула. - http://www.femto.com.ua/articles/part_1/2328.html
Эффективные операторы в теории строения электронных оболочек молекул - <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/zajzevskii/welcome.html>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Физические свойства и динамика молекул" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебная аудитория для проведения лекционных и семинарских занятий.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Фаткуллин Н.Ф. _____

Маклаков А.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Скирда В.Д. _____

"__" _____ 201__ г.