

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Тагиров Л.Р.

20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Теоретические основы спектроскопии Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Еремин М.В.

Рецензент(ы):

Тагиров Л.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Тагиров М. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No 647317

Казань

2017

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) Еремин М.В. Кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии Отделение радиофизики и информационных систем , Mikhail.Eremin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины являются знакомство с накопленным в мировой литературе материалом о спектроскопических методах изучения энергетической структуры соединений с незаполненными 3d- и 4f- оболочками.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.04.02 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1, 2 семестры.

Входит в блок профессиональных дисциплин для изучения в рамках магистерской программы "Физика конденсированного состояния" (блок ДВ.6).

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)	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки
ОПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе)
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- современный теоретический уровень описания спектров и соответствующих им энергетических уровней,
- современные методы экспериментальных исследований,
- основные методы расчета,

2. должен уметь:

уметь применять современные методы теоретического анализа оптических и микроволновых спектров.

3. должен владеть:

- навыками системного научного анализа проблем (как природных, так и профессиональных) различного уровня сложности;
- навыками анализа данных, полученных различными экспериментальными методами спектроскопии конденсированного состояния.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

- понимать основные механизмы и модели описания взаимодействия, формирующие энергетическую схему уровней , освоить основные приемы расчета вывода эффективных спин-спиновых гамильтонианов и операторов взаимодействия квазичастиц,
- обладать теоретическими знаниями о существующих модельных представлениях в теории конденсированных сред и уметь пользоваться ими.
- ориентироваться в существующих приближениях и приобрести навыки в практических расчетах.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных(ые) единиц(ы) 216 часа(ов).
 Форма промежуточного контроля дисциплины отсутствует в 1 семестре; экзамен во 2 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. Теория свободных атомов.	1	1	2	0	0	Устный опрос
2.	Тема 2. Представление момента количества движения.	1	2	2	0	0	Письменное домашнее задание
3.	Тема 3. Термы электронных конфигураций свободных атомов и ионов	1	3-4	4	0	0	Письменное домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Тонкая структура термов.	1	5	2	0	0	Письменное домашнее задание
6.	Тема 6. Расчет энергий термов	1	6	2	0	0	Письменное домашнее задание
7.	Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными	1	7	2	0	0	Письменное домашнее задание
8.	Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.	1	8	2	0	0	Контрольная работа
9.	Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.	1	9	2	0	0	Письменное домашнее задание
10.	Тема 10. Рентгеновские спектры	2	10	2	0	0	Устный опрос
11.	Тема 11. Оптические спектры ионов с незаполненными 3d- и 4f-оболочками	2	11-12	4	4	0	Письменное домашнее задание
12.	Тема 12. Вероятности оптических переходов	2	13	2	0	0	Письменное домашнее задание
13.	Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.	2	14-15	4	4	0	Контрольная работа
14.	Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.	2	16-17	4	4	0	Письменное домашнее задание
15.	Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .	2	18	2	6	0	Письменное домашнее задание
.	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Экзамен
	Итого			36	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Теория свободных атомов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уровни энергии атома водородоподобных ионов. Классификация состояний. Приближение центрального поля. Принцип Паули. Слетеровские детерминанты.

Тема 2. Представление момента количества движения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Построение волновых функций с учетом принципа Паули. Матричные элементы операторов момента количества движения. Операторы повышения и понижения по магнитному квантовому числу.

Тема 3. Термы электронных конфигураций свободных атомов и ионов

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Классификация термов. Мультиплетность. Кратность вырождения. термов. Родоначальное число.

Тема 5. Тонкая структура термов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Правило интервалов Ланде. Прямые и обращенные мультиплеты. Построение волновых функции мультиплетов. $3-j$ символы.

Тема 6. Расчет энергий термов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Разложение оператора энергии кулоновского взаимодействия по сферическим тензорам. Теорема Вигнера -Эккарта. Параметры Слетера

Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение параметров Слетера (Рака) методом наименьших квадратов. Обзор проблемы расчета параметров на хартри-фоковских волновых функциях

Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Оператор кристаллического поля. Метод эквивалентных операторов. Схемы слабого и сильного кристаллических полей. Низкоспиновые комплексы.

Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Контактное взаимодействие Ферми. Методы определения параметров. ЭПР. ЯМР. Эффект Мессбауэра.

Тема 10. Рентгеновские спектры

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Классификация межконфигурационных переходов. Правила отбора. Примеры применения.

Тема 11. Оптические спектры ионов с незаполненными 3d- и 4f- оболочками

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Классификация состояний в приближении центрального поля. Правила отбора. Особенности оптических спектров кристаллов, активированных ионами с незаполненными 3d- и 4f- оболочками

практическое занятие (4 часа(ов)):

Расчет расщеплений в кристаллическом поле. Теоретико-групповая классификация состояний. Схема сильного кристаллического поля.

Тема 12. Вероятности оптических переходов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Магнитно-дипольные переходы. Вынужденные электро-дипольные переходы в кристаллах без центра инверсии. Теория Джадда- Оффельта.

Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Метод спинового гамильтониана. Спиновых гамильтониан сверхтонкого взаимодействия.

Лигандная сверхтонкая структура

практическое занятие (4 часа(ов)):

Расчет компонент g-тензора. Случаи незаполненных d- и f - оболочек. Пример определения волновой функции основного состояния по данным ЭПР.

Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Электронно-колебательное взаимодействие. Адиабатические потенциалы. Статический и динамический эффекты Яна-Теллера.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Эффект Яна-Теллера в случае двухкратно вырожденного орбитального состояния. Кооперативное упорядочение орбиталей.

Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Фотоэлектронная спектроскопия. Определений поверхностей Ферми для слоистых сверхпроводников. Плотности состояний и групповые скорости.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Приближение сильной связи. Расчет плотности состояний. Псевдощелевые состояния.

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. Теория свободных атомов.	1	1	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
2.	Тема 2. Представление момента количества движения.	1	2	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
3.	Тема 3. Термы электронных конфигураций свободных атомов и ионов	1	3-4	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
5.	Тема 5. Тонкая структура термов.	1	5	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
6.	Тема 6. Расчет энергий термов	1	6	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
7.	Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными	1	7	подготовка домашнего задания	12	домашнее задание
8.	Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.	1	8	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.	1	9	подготовка домашнего задания	8	домашнее задание
10.	Тема 10. Рентгеновские спектры	2	10	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
11.	Тема 11. Оптические спектры ионов с незаполненными 3d- и 4f-оболочками	2	11-12	подготовка домашнего задания	18	домашнее задание
12.	Тема 12. Вероятности оптических переходов	2	13	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
13.	Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.	2	14-15	подготовка домашнего задания	14	домашнее задание
14.	Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.	2	16-17	подготовка домашнего задания	14	домашнее задание
15.	Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .	2	18	подготовка домашнего задания	16	домашнее задание
	Итого				126	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекции, практика в сочетании с индивидуальными домашними заданиями.

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

Тема 1. Теория свободных атомов.

устный опрос , примерные вопросы:

Квантовые числа, кратность вырождения терма, родоначалное число, слетеровские детерминанты

Тема 2. Представление момента количества движения.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет матричных элементов заданного оператора в базисе состояний основного терма.

Тема 3. Термы электронных конфигураций свободных атомов и ионов

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение термов заданной электронной конфигурации

Тема 5. Тонкая структура термов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение волновой функции для основного терма

Тема 6. Расчет энергий термов

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет энергии заданного терма.

Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение параметров Слетера по экспериментальной схеме уровней

Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет энергетической схемы уровней и волновых функций в кубическом кристаллическом поле

Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение эффективного оператора сверхтонкого взаимодействия в представлении полного момента иона. .

Тема 10. Рентгеновские спектры

домашнее задание , примерные вопросы:

Классификация спектров. Применение для исследования электронной структуры конденсированных сред.

Тема 11. Оптические спектры ионов с незаполненными 3d- и 4f- оболочками

домашнее задание , примерные вопросы:

Диаграммы Сугано Танабе. Метод эквивалентных операторов. Приведенные матричные элементы.

Тема 12. Вероятности оптических переходов

домашнее задание , примерные вопросы:

Правила отбора для магнитно дипольных, квадрупольных и электро дипольных переходов. Фонновые сателлиты. Вынужденные электрически дипольные переходы.

Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет параметров спектра ЭПР заданного иона. Сопоставление с литературными данными

Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.

домашнее задание , примерные вопросы:

Нормальные координаты октаэдрических комплексов. Определение вида оператора электронно-колебательного взаимодействия, соответствующего орбитальному триплету.

Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет закона дисперсии квазичастиц в приближении сильной связи. Расчет плотности состояний для плоской решетки. Особенность Ван-Хова

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы

1. Схема энергетических уровней свободных атомов .
Термы электронных конфигураций.
2. Волновые функции многоэлектронных атомов .
3. Схема слабого кристаллического поля
4. Схема сильного кристаллического поля
5. Правила отбора магнитно дипольных и электро дипольных переходов.
6. Метод спинового гамильтониана в теории ЭПР.
7. Электронно-ядерные взаимодействия.

Вопросы способствуют развитию компетенций: ОК-1, ОПК-5, ОПК-6, ПК-1, ПК-2.

7.1. Основная литература:

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика, т. 3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М. Наука, 2009
2. Сергеев, Н. А. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса: монография / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - М. : Логос, 2013. - 272 с. - ISBN 978-5-98704-754-
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=469025>
3. Зарипов, М. М. Основы теории спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах : курс лекций / М. М. Зарипов .? Казань : Казанский государственный университет, 2009 .? 212 с.: ил.

7.2. Дополнительная литература:

1. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп, Том. II / А. Абрагам, Б. Блини, Том. II, Мир, Москва, 1973, 349с
2. Смирнов А.И. Свиридов Д.Т. Теория оптических спектров ионов с недостроенными электронными оболочками, М.: Наука, 1982.
3. Теория оптических спектров, часть 1 Классические методы/ А.М.Леушин- Казань , Казанский университет. - 2007. - 107 с.
http://kpfu.ru/publication?p_id=12478

7.3. Интернет-ресурсы:

Видеолекция по теории кристаллического поля -
<http://theopenacademy.com/content/lecture-28-transition-metals-2-crystal-field-theory>
Данные об уровнях энергии свободных ионов - <http://physics.nist.gov/cgi-bin/ASD/energy1.pl>
Конспект лекций - <http://mission.igic.bas.bg/downloads/Lecture2.pdf>
Методическое пособие - http://kpfu.ru/publication?p_id=12475
Программа расчета 3-j и 6-j символов - <http://www-stone.ch.cam.ac.uk/wigner.shtml>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теоретические основы спектроскопии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Методические пособия, интернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе Физика атомов и молекул .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Тагиров Л.Р. _____

"__" _____ 201__ г.