

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. Тагировский Да



20\_\_ г.

подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Теоретические основы спектроскопии Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика конденсированного состояния

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 № \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК № \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный № 647417

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<br>(общекультурные компетенции)    | способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу   |
| ОПК-5<br>(профессиональные компетенции) | способностью использовать свободное владение профессионально-профицированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки |
| ОПК-6<br>(профессиональные компетенции) | способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе )  |
| ПК-1<br>(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<br>(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<br>Дисциплины/<br>Модуля                                 | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля   |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|-----------------------------|
|    |   |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                             |
| 1. | Тема 1. Теория свободных атомов.                                | 1       | 1                  | 2   | 0                       | 0                      | Устный опрос                |
| 2. | Тема 2.<br>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<br>Дисциплины/<br>Модуля   | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля   |
|-----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|-----------------------------|
|     |   |         |                    | Лекции  | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>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-й 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- Офельта.

**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. Случай 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 двух кратно 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. Псевдоцелевые состояния.

### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

| N  | Раздел<br>Дисциплины  | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды<br>самостоятельной<br>работы<br>студентов | Трудоемкость<br>(в часах) | Формы контроля<br>самостоятельной<br>работы |
|----|---|---------|--------------------|--|---------------------------|---|
| 1. | Тема 1. Теория свободных атомов.  | 1       | 1                  | подготовка к устному опросу                    | 6                         | устный опрос                                |
| 2. | Тема 2.<br>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<br>Дисциплины   | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды<br>самостоятельной<br>работы<br>студентов | Трудоемкость<br>(в часах) | Формы контроля<br>самостоятельной<br>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 незаполнными 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                            |
| <b>Итого</b> |  |         |                    |  | <b>126</b>                |   |

## 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, родоначальное 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 Слетеера 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. Фонноные 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 октаэдических 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. Блинни, 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](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](http://kpfu.ru/publication?p_id=12475)

Программа расчета 3-й и 6-й 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 конденсированного состояния .

Автор(ы):

Еремин М.В. \_\_\_\_\_  
"\_\_\_" \_\_\_\_ 201 \_\_\_\_ г.

Рецензент(ы):

Тагиров Л.Р. \_\_\_\_\_  
"\_\_\_" \_\_\_\_ 201 \_\_\_\_ г.