

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



» 20 г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Строение электронных оболочек Б1.В.ДВ.17

Направление подготовки: 03.03.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Еремин М.В.

Рецензент(ы):

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 № 6163118

Казань

2018

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 Б3.В.8 "Строение электронных оболочек" являются знакомство с накопленным в мировой литературе материалом об энергетической структуре электронных оболочек переходных металлов в кристаллах, о пространственном распределении электронных облаков в основных и возбужденных состояниях.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.17 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.03.03 Радиофизика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина Б3.В.8 "Строение электронных оболочек" входит в профессиональный цикл (блок Б3) бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика" и является обязательной для изучения.

Изучение данной дисциплины базируется на подготовке по физике и математике в рамках Государственного стандарта общего образования, дисциплин подготовки бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика": Б3.Б.5 "Атомная и ядерная физика", Б2.Б.4 "Квантовая механика".

Дисциплина является базовой для последующего изучения дисциплин по профилю "Квантовая электроника". Она предшествует курсам (Б3.В.9 "Спинtronика", В3.ДВ1 "Лазерные кристаллы", В3.ДВ2 "Основы магнитного резонанса", Б3.ДВ4 "Фемтосекундная спектроскопия", для выполнения лабораторных работ в рамках занятий по дисциплине Б3.ДВ3 "Лаборатория по квантовой электроники "

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.
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач.
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки).
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки)

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

современные методы расчета энергетических схем уровней энергии ионов переходных групп ; основные схемы классификации атомных состояний, включая теоретико групповую классификацию многочастичных состояний ; схемы расчета правил отбора для вероятностей переходов.

2. должен уметь:

- применять разработанные схемы расчета энергетических уровней и волновых функций для вновь изучаемых веществ;
- рассчитывать магнитные характеристики основных и возбужденных состояний ионов

3. должен владеть:

- навыками построения картин электронной плотности;
- навыками работы с учебной и научной литературой.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

к решению задач Квантовой радиофизики

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 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. Электронные оболочки атомов.	7	1	4	0	6	Письменное домашнее задание
2.	Тема 2. Волновые функции многоэлектронных атомов. Оператор антисимметризации и его свойства.	7	3-4	2	0	8	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	
3.	Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .	7	5-6	4	0	6	Контрольная работа
4.	Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов	7	6-8	2	0	4	Письменное домашнее задание
5.	Тема 5. Элементы теории симметрии	7	9-10	2	0	4	Письменное домашнее задание
6.	Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.	7	15	2	0	4	Письменное домашнее задание
7.	Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля	7	18	2	0	4	Контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Экзамен
	Итого			18	0	36	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Электронные оболочки атомов.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Приближение центрального поля. Электронные конфигурации и оболочки атомов

лабораторная работа (6 часа(ов)):

Определение электронных конфигураций. Кратность вырождения.

Тема 2. Волновые функции многоэлектронных атомов. Оператор антисимметризации и его свойства.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Термы электронных конфигураций. Классификация повторяющихся термов по родоначальному числу.

лабораторная работа (8 часа(ов)):

Расчет волновых функций.

Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Общие выражения для расчета матричных элементов.

лабораторная работа (6 часа(ов)):

Примеры расчета матричных элементов.

Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Техника сложения моментов количества движения. п-ј символы. Теорема Вигнера -Эккарта. Генеалогические коэффициенты. Приведенные матричные элементы.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Примеры расчета приведенных матричных элементов. Метод эквивалентных операторов.

Тема 5. Элементы теории симметрии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Элементы симметрии. Группа симметрии октаэдра.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Классы сопряженных элементов октаэдра

Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Базисные функции неприводимых представлений октаэдра

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Таблица произведения представлений.

Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Расщепление состояний d-электрона в кубическом кристаллическом поле. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Построение волновых функций в схеме сильного кристаллического поля. Расчет матричных элементов.

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. 1. Электронные оболочки атомов.	7	1	подготовка домашнего задания	2	письменное домашнее задание
				подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
2.	Тема 2. Волновые функции многоэлектронных атомов. Оператор антисимметризации и его свойства.	7	3-4	подготовка домашнего задания	2	письменное домашнее задание
3.	Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .	7	5-6	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
4.	Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов	7	6-8	подготовка домашнего задания	2	письменное домашнее задание
5.	Тема 5. Элементы теории симметрии	7	9-10	подготовка домашнего задания	2	письменное домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
6.	Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.	7	15	подготовка домашнего задания	2	письменное домашнее задание
7.	Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля	7	18	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
	Итого				18	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекции и практические занятия

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**Тема 1. Введение. Электронные оболочки атомов.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Матричные элементы операторов момента количества движения.

письменное домашнее задание , примерные вопросы:

Найти всевозможные термы заданной электронной конфигурации

Тема 2. Волновые функции многоэлектронных атомов. Оператор антисимметризации и его свойства.

письменное домашнее задание , примерные вопросы:

Построение волновых функций термов через одноэлектронные функции.

Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .

контрольная работа , примерные вопросы:

Построение волновых функций с помощью операторов повышения и понижения квантовых чисел.

Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов

письменное домашнее задание , примерные вопросы:

Рассчитать значения приведенных матричных элементов для заданного основного состояния иона переходного металла.

Тема 5. Элементы теории симметрии

письменное домашнее задание , примерные вопросы:

Выписать элементы симметрии заданной точечной группы и найти классы сопряженных элементов

Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.

письменное домашнее задание , примерные вопросы:

Найти матриц элементов симметрии октаэдра , соответствующие двумерному представлению.

Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля

контрольная работа , примерные вопросы:

Рассчитать значения компонент g- тензора при заданных волновых функциях основного состояния редкоземельного иона или иона группы железа.

Итоговая форма контроля

экзамен

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы:

1. Классификация термов d_n - и f_n - конфигураций
2. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов
3. Сложение моментов. Волновые функции в представлении момента количества движения
4. Теорема Вигнера -Эккарта. Приведенные матричные элементы
- 5 Техника расчета приведенных матричных элементов
- 6 Тонкая структура термов
7. Схема сильного кристаллического поля
8. Классы сопряженных элементов кубической группы.
9. Неприводимые представления кубических групп.
10. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля
11. Расчет энергий термов. Метод диагональных сумм.

7.1. Основная литература:

1. Кочелаев, Б.И. Квантовая теория: конспект лекций / Б. И. Кочелаев; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, [2-е изд., перераб., доп. и испр.].-Казань: [Казанский университет], 2013.-222 с.
 2. Леушин, А.М.Теория оптических спектров, часть 2. Операторная техника [Текст] / А.М.Леушин.-Казанский университет.-2008. - 190 с.
- Скачать: http://kpfu.ru/portal/docs/F1651974492/tos_p1.pdf
3. Еремин, М.В. Микроскопические модели в конденсированных средах [Текст] / М.В.Еремин. -Казанский университет. - 2011. -111 с.
http://kpfu.ru/docs/F1043614157/Eremin_Posobie_2011.doc

7.2. Дополнительная литература:

1. Абрагам, А. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп , Том.1 [Текст] / А. Абрагам, Б. Блинни - М.: Мир, 1973. -651с.
 2. Малкин, Б.З.Квантовая теория парамагнетизма. Конспект лекций [Текст]/ Малкин Б.З.- Из-во КФУ, 2006.- 83 с.
- Скачать: http://kpfu.ru/portal/docs/F800871619/quant_theory_param.pdf

7.3. Интернет-ресурсы:

- Программа для расчета 3-ј , 6-ј и 9-ј символов - <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/369j.html>
- Таблицы 3-ј символов - <http://www.svengato.com/threej.html>
- Таблицы 6-ј символов - <http://www.svengato.com/sixj.html>
- Теория оптических спектров. Часть 1 - http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205
- Теория оптических спектров. Часть 2 (операторная техника). -
http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8205

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Строение электронных оболочек" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Лекционная аудитория, справочники, учебники, интернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.03.03 "Радиофизика" и профилю подготовки Физика магнитных явлений .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____
"___" ____ 201 ____ г.

Рецензент(ы):

"___" ____ 201 ____ г.