

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Теоретические основы спектроскопии

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) главный научный сотрудник, д.н. (профессор) Еремин М.В. (НИЛ магнитной радиоспектроскопии и квантовой электроники им. С.А. Альтшулера, Кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии), Mikhail.Eremin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОПК-5	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	способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе
ПК-1	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

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

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

Должен уметь:

уметь применять современные методы теоретического анализа оптических и микроволновых спектров.

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.

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.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

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

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

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

Контактная работа - 54 часа(ов), в том числе лекции - 36 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 126 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: отсутствует в 1 семестре; экзамен во 2 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Теория свободных атомов.	1	2	0	0	6
2.	Тема 2. Представление момента количества движения.	1	2	0	0	4
3.	Тема 3. Термы электронных конфигураций свободных атомов и ионов	1	4	0	0	6
5.	Тема 5. Тонкая структура термов.	1	2	0	0	6
6.	Тема 6. Расчет энергий термов	1	2	0	0	6
7.	Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными	1	2	0	0	12
8.	Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.	1	2	0	0	6
9.	Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.	1	2	0	0	8
10.	Тема 10. Рентгеновские спектры	2	2	0	0	6
11.	Тема 11. Оптические спектры ионов с незаполненными 3d- и 4f-оболочками	2	4	4	0	18
12.	Тема 12. Вероятности оптических переходов	2	2	0	0	4
13.	Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.	2	4	4	0	14
14.	Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.	2	4	4	0	14
15.	Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .	2	2	6	0	16
	Итого		36	18	0	126

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Теория свободных атомов.

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

Тема 2. Представление момента количества движения.

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

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

Тема 5. Тонкая структура термов.

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

Тема 6. Расчет энергий термов

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

Тема 7. Сопоставление энергетической схемы с экспериментальными данными

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

Тема 8. Расщепления в кристаллическом поле.

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

Тема 9. Сверхтонкие взаимодействия.

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

Тема 10. Рентгеновские спектры

Классификация межконфигурационных переходов. Правила отбора.

Примеры применения.

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

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

Тема 12. Вероятности оптических переходов

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

Тема 13. Электронный парамагнитный резонанс.

Метод спинового гамильтониана. Спиновых гамильтониан сверхтонкого взаимодействия. Лигандная сверхтонкая структура

Тема 14. Электронно-колебательное взаимодействие.

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

Тема 15. Фотоэлектронная спектроскопия .

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

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

А. М. Леушин. Теория оптических спектров (1) -

<http://kpfu.ru/physics/struktura/kafedry/kafedra-teoreticheskoy-fiziki/metodicheskie-materialy>

А. М. Леушин. Теория оптических спектров (2) -

<http://kpfu.ru/physics/struktura/kafedry/kafedra-teoreticheskoy-fiziki/metodicheskie-materialy>

М. В. Еремин. Микроскопические модели в конд. средах -

<http://kpfu.ru/physics/elektronnye-materialy/uchebnye-i-metodicheskie-materialy/metodicheskie-posobiya://www.twirpx.com/file>

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

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>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Задание 1. Построение волновых функций заданного терма. Использовать операторы повышения и понижения квантовых чисел

Задание 2. Расчет энергии терма заданной электронной конфигурации. Предварительно разложить оператор взаимодействия электронов по сферическим функциям.

Задание 4. Расчет интенсивности переходов. Применить теорему Вигнера-Экарта и использовать соотношение ортогональности 3-j символов.

Задание 5. Расчет компонент g-тензора при заданной волновой функции. Для элементов группы железа использовать схему промежуточного кристаллического поля. Для редкоземельных элементов применить схему слабого кристаллического поля.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;

- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;

- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;

- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

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

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.4 Теоретические основы спектроскопии

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Основная литература:

1. Кочелаев Б.И. Квантовая теория: конспект лекций / Б. И. Кочелаев; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики.-[2-е изд., перераб., доп. и испр.].-Казань: [Казанский университет], 2013.-222 с.
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.

Дополнительная литература:

1. Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных групп, Том. II / А. Абрагам, Б. Блини, Том. II, Мир, Москва, 1973, 349с
2. Леушин, А.М. Теория оптических спектров: учебное пособие, Ч. 2 / А. М. Леушин. - Казань,Изд-во Казанского госуд. ун-та, 2008. - 190 с. http://kpfu.ru/docs/F1036540171/tos_p2.pdf

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.4 Теоретические основы спектроскопии

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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, учебно-методические комплексы, 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 образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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.