

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
Строение электронных оболочек Б3.В.8

Направление подготовки: 011800.62 - Радиофизика

Профиль подготовки: Квантовая радиофизика и квантовая электроника

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Еремин М.В.

Рецензент(ы):

Тагиров М.С.

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 № 6162414

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) 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 " Б3.В.8 Профессиональный" основной образовательной программы 011800.62 Радиофизика и относится к вариативной части. 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 зачет 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	2	0	2	домашнее задание
2.	Тема 2. Волновые функции многоэлектронных атомов. Оператор антисимметризации и его свойства.	7	3-4	4	0	2	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	10	0	4	контрольная работа
4.	Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов	7	6-8	8	0	4	домашнее задание
5.	Тема 5. Элементы теории симметрии	7	9-10	4	0	2	письменная работа
6.	Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.	7	15	4	0	2	домашнее задание
7.	Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля	7	18	4	0	2	контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	зачет
	Итого			36	0	18	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Электронные оболочки атомов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Приближение центрального поля. Электронные конфигурации и оболочки атомов

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Определение электронных конфигураций. Кратность вырождения.

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

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Термы электронных конфигураций. Классификация повторяющихся термов по родоначальному числу.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Расчет волновых функций.

Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .

лекционное занятие (10 часа(ов)):

Общие выражения для расчета матричных элементов.

лабораторная работа (4 часа(ов)):

Примеры расчета матричных элементов.

Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов

лекционное занятие (8 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 (4 часа(ов)):

Элементы симметрии. Группа симметрии октаэдра.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Классы сопряженных элементов октаэдра

Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Базисные функции неприводимых представлений октаэдра

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Таблица произведения представлений.

Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля

лекционное занятие (4 часа(ов)):

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

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

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	10	домашнее задание
7.	Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля	7	18	подготовка к письменной работе	4	письменная работа
	Итого				54	

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.

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

домашнее задание , примерные вопросы:

Построение волновых функций в представлении момента количества движения

Тема 3. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов .

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет матричных элементов оператора кулоновского взаимодействия электронов методом диагональных сумм.

Тема 4. Техника неприводимых тензорных операторов и генеалогических коэффициентов

домашнее задание , примерные вопросы:

Расчет приведенных матричных элементов для основных состояний атомов с недостроенными d- или f- оболочками.

Тема 5. Элементы теории симметрии

письменная работа , примерные вопросы:

Классы сопряженных элементов

Тема 6. Неприводимые представления . Таблица характеров.

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение правил отбора электрических и магнито ?дипольных переходов.

Тема 7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля

письменная работа , примерные вопросы:

Оператор проектирования. Нормальные координаты октаэдра.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы:

1. Классификация термов d_n - и f_n - конфигураций
2. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов
3. Сложение моментов. Волновые функции
4. Теорема Вигнера -Эккарта. Приведенные матричные элементы
5. Классы сопряженных элементов кубической группы.
6. Неприводимые представления кубических групп.
7. Электронные оболочки в схеме сильного кристаллического поля

7.1. Основная литература:

1. Физика. Волновая оптика. Квантовая природа излучения. Элементы атомной и ядерной физики: Учеб. пос. / С.И.Кузнецов, А.М.Лидер - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Вузов. учеб.: НИЦ ИНФРА-М, 2015 - 212 с.: 60x90 1/16.(п) ISBN 978-5-9558-0350-0, 500 экз.
<http://www.znanium.com/bookread.php?book=438135>

ЭБС

"Знаниум"

2. Давыдов А. С. Квантовая механика: учеб. пособие. ? 3 изд., стереотипное. ? СПб.: БХВ-Петербург, 2011. ? 704 с.: ил. ? (Учебная литература для вузов). - ISBN 978-5-9775-0548-2.
<http://znanium.com/bookread.php?book=351130>

ЭБС

"Знаниум"

3. Сергеев, Н. А. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса : монография / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - М. : Логос, 2013. - 272 с. - ISBN 978-5-98704-754-5.
<http://znanium.com/bookread.php?book=469025>

ЭБС

"Знаниум"

7.2. Дополнительная литература:

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. 3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М. Наука, 2009 3
2. Квантовая механика : перевод с французского / А. Мессия ; Пер. с фр. П. П. Кулиша; Под ред. Л. Д. Фаддеева .? Москва : Наука, 1979. .? 584 с. : ил. 19/21
3. Квантовая механика : перевод с английского / Л. Шифф ; Пер. Г. А. Зайцева .? Издание 2-е .? Москва : Изд-во иностранной литературы, 1959 .? 475 с. ; 23 см. ? Пер. изд.: Quantum Mechanics / Leonard I. Schiff (New York etc.: McGraw-Hill book Company, 1955) .? Библиогр.: с. 459-460 (17 назв.) .? Предм. указ.: с. 461-464. 14
4. Методические указания по квантовой механике / Сост. Н.Г. Колоскова .? Казань, 1990 .? 38с. 215

7.3. Интернет-ресурсы:

Программа для расчета 3-й , 6-й и 9-й символов - <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/369j.html>

Таблицы 3-й символов - <http://www.svengato.com/threej.html>

Таблицы 6-й 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 011800.62 "Радиофизика" и профилю подготовки Квантовая радиофизика и квантовая электроника .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____
" " 201 __ г.

Рецензент(ы):

Тагиров М.С. _____
" " 201 __ г.