

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

Теория оптических спектров ФТД.Б.2

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая и математическая физика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Соловьев О.В.

Рецензент(ы):

Малкин Б.З.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Прошин Ю. Н.

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

Учебно-методическая комиссия Института физики:

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

Регистрационный No 6147514

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) ассистент, к.н. Соловьев О.В. Кафедра теоретической физики Отделение физики , Oleg.Solovyev@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Теория оптических спектров" являются изучение основных понятий, моделей, методов теории оптических спектров ионов переходных и редкоземельных элементов, находящихся во внутрикристаллических электрических и внешнем магнитном полях.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " ФТД.Б.2 Факультативы" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Дисциплина входит в вариативную часть профессионального цикла как факультатив ФТД.2. Дисциплина базируется на освоении дисциплин: теория симметрии , электродинамика , теория групп , квантовая теория , теоретические основы спектроскопии . Освоение данной дисциплины необходимо для успешного выполнения учебной практики по теории оптических спектров

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 демонстрировать углубленные знания в области математики и естественных наук
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность свободно владеть фундаментальными разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры, оборудования, информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способность использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки
ПК-9 (профессиональные компетенции)	способность организовать и планировать физические исследования

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные физические концепции и приближения, использующиеся в теории оптических спектров свободного атома и атома в кристалле

2. должен уметь:

предсказывать структуру энергетического спектра иона переходного или редкоземельного элемента, внедренного в кристаллическую решетку

3. должен владеть:

математическим аппаратом анализа спектров свободных и примесных ионов с незаполненными d и f оболочками

4. должен демонстрировать способность и готовность:

к дальнейшему обучению

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 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. Основные приближения, используемые в теории сложных атомов	3	1	1	2	0	презентация
2.	Тема 2. Классические методы Кондона, Шортли и Слетера расчета энергетического спектра свободного атома	3	2-5	3	8	0	домашнее задание
3.	Тема 3. Техника Рака в теории атомных спектров	3	6-8	3	6	0	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	
4.	Тема 4. Взаимодействие атома с внутрикристаллическим полем и внешним магнитным полем	3	9-10	2	4	0	домашнее задание
5.	Тема 5. Взаимодействие атома с электромагнитным излучением	3	11	1	2	0	презентация
6.	Тема 6. Электронно-колебательные оптические спектры примесных ионов	3	12-13	2	4	0	презентация
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			12	26	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основные приближения, используемые в теории сложных атомов

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Приближение центрального поля, электронные конфигурации, слетеровские детерминанты, одноконфигурационное приближение, приближение Рессель-Саундерса, приближение jj -связи.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Доказательство теорем о собственных функциях коммутирующих операторов. Формулировка методики перечисления слетеровских детерминантов. Самостоятельное упражнение: перечисление всех слетеровских детерминантов основной конфигурации атома S.

Тема 2. Классические методы Кондона, Шортли и Слетера расчета энергетического спектра свободного атома

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Общая картина расщепления конфигурации под действием электростатического взаимодействия электронов, спектральные термы. Нахождение термов многоэлектронных конфигураций. Случай неэквивалентных электронов. Случай эквивалентных электронов. Спин-орбитальное взаимодействие электронов. Тонкая структура термов. Вид матриц кулоновского и спин-орбитального взаимодействия электронов в различных базисах. Коэффициенты Клебша-Гордона, $3j$ -символы, их свойства. Переход от схемы полных орбитального и спинового моментов к слетеровским детерминантам. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов на слетеровских детерминантах. Матричные элементы электростатического взаимодействия электронов. Метод диагональных сумм Слетера. Матричные элементы спин-орбитального взаимодействия электронов.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Доказательство коммутации операторов полного орбитального и полного спинового моментов атома с гамильтонианом центрального поля и гамильтонианом кулоновского взаимодействия электронов. Доказательство коммутации оператора полного момента атома с гамильтонианом спин-орбитального взаимодействия. Нахождение термов конфигурации np^2 . Нахождение термов конфигурации np^3 . Самостоятельное упражнение: разложение по слетеровским детерминантам волновой функции $|f^3 2I MS=1/2 ML=6\rangle$. Самостоятельное упражнение: перечисление слетеровских интегралов, встречающихся при вычислении энергий термов конфигурации $4f125d$.

Тема 3. Техника Рака в теории атомных спектров

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Неприводимые представления группы вращений, неприводимые тензорные операторы, теорема Вигнера-Экарта и способы ее применения. Соотношения для матричных элементов неприводимых представлений группы вращений. $6j$ -символы, $9j$ -символы и их свойства. Алгебра тензорных операторов. Смешанные и двойные тензорные операторы и вычисление их матричных элементов. Генеалогические коэффициенты (одно- и двухчастичные), число старшинства.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Доказательство равенства инфинитезимальных операторов представления группы вращений в гильбертовом пространстве и операторов квантово-механического момента (1 частица без спина, N частиц без спина, 1 частица со спином, N частиц со спином). Самостоятельное упражнение: вывод выражения матричного элемента скалярного произведения неприводимых тензорных операторов через приведенные матричные элементы операторов в своих пространствах.

Тема 4. Взаимодействие атома с внутрикристаллическим полем и внешним магнитным полем

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Модель кристаллического поля. Теоретико-групповой анализ потенциала кристаллического поля. Параметры кристаллического поля в модели точечных зарядов. Параметры кристаллического поля в модели обменных зарядов. g -фактор Ланде.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Доказательство 4-х свойств матричных элементов неприводимых представлений группы вращений. Вывод гамильтониана кристаллического поля в модели обменных зарядов.

Тема 5. Взаимодействие атома с электромагнитным излучением

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Разложение запаздывающих потенциалов. Излучение диполя, квадрупольного и магнитного диполя. Вынужденное излучение и поглощение. Нахождение вероятностей оптических переходов.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Правила отбора матричных элементов мультипольных моментов. Самостоятельное упражнение: вычислить, сколько электрических дипольных переходов будет видно в спектре поглощения иона Se^{3+} в кубическом кристаллическом поле. Самостоятельное упражнение: если в спектре $4f-5d$ поглощения иона Lu^{3+} видно 35 переходов, то какова поляризация падающего излучения.

Тема 6. Электронно-колебательные оптические спектры примесных ионов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электрон-фононное взаимодействие. Линейно-гармоническое приближение в модели электронно-колебательной системы. Производящая функция оптического перехода примесного иона в адиабатическом приближении, формула Кубо, формула Лэкса. Форма спектров поглощения и люминесценции примесных ионов в "кондоновском" приближении.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Вывод формулы для производящей функции поглощения в "кондоновском" приближении по методу Фейнмана. Доказательство зеркальной симметрии спектров люминесценции и поглощения в "кондоновском" приближении. Способ вычисления решеточных сумм через функции Грина кристаллической решетки. Самостоятельное упражнение: вывести формулу для решеточной функции Грина, связывающей две нормальных координаты.

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. Основные приближения, используемые в теории сложных атомов	3	1	подготовка к докладу	8	презентация
2.	Тема 2. Классические методы Кондона, Шортли и Слетера расчета энергетического спектра свободного атома	3	2-5	подготовка домашнего задания	20	домашнее задание
3.	Тема 3. Техника Рака в теории атомных спектров	3	6-8	подготовка домашнего задания	15	домашнее задание
4.	Тема 4. Взаимодействие атома с внутрикристаллическим полем и внешним магнитным полем	3	9-10	подготовка домашнего задания	10	домашнее задание
5.	Тема 5. Взаимодействие атома с электромагнитным излучением	3	11	подготовка к докладу	7	презентация
6.	Тема 6. Электронно-колебательные оптические спектры примесных ионов	3	12-13	подготовка к докладу	10	презентация
	Итого				70	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Курсы лекций и практических занятий, доклады в форме презентаций с использованием мультимедийного оборудования.

Решение задач в компьютерном классе.

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

Тема 1. Основные приближения, используемые в теории сложных атомов

презентация , примерные вопросы:

Доклад по одной из следующих тем данного раздела дисциплины: 1. Одноэлектронные состояния в приближении центрального поля. 2. Свойства слетеровских детерминантов. 3. Квантовые числа электрона в приближении jj -связи 4. j -конфигурации в случае неэквивалентных и в случае эквивалентных электронов.

Тема 2. Классические методы Кондона, Шортли и Слетера расчета энергетического спектра свободного атома

домашнее задание , примерные вопросы:

Задачи: 1. Найти термы конфигурации d^3 . 2. Выражение энергий термов конфигурации d^3 через диагональные матричные элементы оператора электростатического взаимодействия 3. Вычисление констант спин-орбитального взаимодействия термов конфигурации d^3

Тема 3. Техника Рака в теории атомных спектров

домашнее задание , примерные вопросы:

Задачи: 1. Вывод ряда соотношений для $6j$ и $9j$ - символов 2. Вывод ряда соотношений для матричных элементов неприводимых представлений группы вращений 3. Вывод свойств коммутации неприводимых тензорных операторов с операторами момента 4. Построение неприводимого тензорного оператора 1 ранга из компонент контравариантного тензора 1 ранга

Тема 4. Взаимодействие атома с внутрикристаллическим полем и внешним магнитным полем

домашнее задание , примерные вопросы:

Задача: Вычисление уровней энергии иона Se^{3+} в кубическом кристаллическом поле (с помощью ЭВМ)

Тема 5. Взаимодействие атома с электромагнитным излучением

презентация , примерные вопросы:

Доклад по одной из следующих тем данного раздела дисциплины: 1. Коэффициент поглощения. 2. Интенсивность люминесценции. 3. Спектры возбуждения. 4. Теория естественной ширины линии. 5. Применение теоретико-группового анализа к вычислению вероятностей оптических переходов.

Тема 6. Электронно-колебательные оптические спектры примесных ионов

презентация , примерные вопросы:

Доклад по одной из следующих тем данного раздела дисциплины: 1. Микроскопический расчет постоянных электрон-фононного взаимодействия. 2. Обзор способов расчета производящей функции оптического перехода примесного иона в адиабатическом приближении 3. Эффект Яна-Теллера. 4. Частотный эффект.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Форма аттестации: зачет

Регламент балльно-рейтинговой системы:

1. Решение домашних задач 30 баллов
2. Первый доклад 10 баллов
3. Второй доклад 10 баллов
3. Зачет 50 баллов

Вопросы для зачета:

1. Приближение центрального поля. Слетеровские детерминанты. Электронная конфигурация атома.
2. Приближение Рессель-Саундерса. Спектральные термы. Нахождение термов многоэлектронных конфигураций.

3. Вывод гамильтониана спин-орбитального взаимодействия. Мультиплетное расщепление термов.
4. Приближение jj -связи: j -конфигурация, нахождение возможных значений J .
5. Общий вид матриц кулоновского и спин-орбитального взаимодействия в различных базисах.
6. Коэффициенты Клебша-Гордона: смысл, соотношения ортогональности. Обратное преобразование Клебша-Гордона. Свойства симметрии $3j$ -символов. Соотношения ортогональности для $3j$ -символов.
7. Переход от схемы полных орбитального и спинового моментов к слетеровским детерминантам.
8. Матричные элементы одночастичных операторов на слетеровских детерминантах: возможные случаи.
9. Матричные элементы двухчастичных операторов на слетеровских детерминантах: возможные случаи.
10. Неприводимые представления группы вращений. Соотношения для матричных элементов.
11. Неприводимые тензорные операторы: определение, вывод коммутационных соотношений с операторами момента.
12. Теорема Вигнера-Эккарта, способы ее применения.
13. Матричные элементы кулоновского взаимодействия электронов: общий случай, обыкновенный интеграл, обменный интеграл.
14. Метод диагональных сумм Слетера.
15. Матричные элементы спин-орбитального взаимодействия. Нахождение связи между постоянной тонкой структуры и одноэлектронным параметром спин-орбитального взаимодействия.
16. Взаимодействие с кристаллическим полем: вид эффективного гамильтониана. Модель точечных зарядов.
17. Модель обменных зарядов в теории кристаллического поля.
18. $6j$ - символы и их свойства.
19. $9j$ - символы и их свойства.
20. Смешанные тензорные операторы и их матричные элементы.
21. Двойные тензорные операторы и их матричные элементы.
22. Генеалогические коэффициенты (одно- и двухчастичные). Число старшинства.
23. Взаимодействие с внешним магнитным полем. g - фактор Ланде.
24. Разложение запаздывающих потенциалов. Излучение диполя, квадруполь и магнитного диполя.
25. Электрическое дипольное и квадрупольное излучение. Магнитное дипольное излучение.
26. Понятие производящей функции оптического перехода, формула Кубо. Производящая функция в адиабатическом приближении, формула Лэкса.
27. Производящая функция оптического перехода в "кондоновском" приближении. Форма спектров поглощения и люминесценции в "кондоновском" приближении. Параметр Хуана-Рис.

7.1. Основная литература:

1. Салех, Бахаа Е. А. Оптика и фотоника. Принципы и применения: [учебное пособие: в 2 томах] / Б. Салех, М. Тейх; пер. с англ. В. Л. Дербова.- Долгопрудный: Интеллект, 2012 Т. 1 .- 2012 .- 759 с., [4] л. ил.
2. Салех, Бахаа Е. А. Оптика и фотоника. Принципы и применения: [учебное пособие: в 2 томах] / Б. Салех, М. Тейх; пер. с англ. В. Л. Дербова.- Долгопрудный: Интеллект, 2012 Т. 2 .- 2012 .- 780 с.: ил.

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. Хамермеш, М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам/М. Хамермеш. - М.: Либроком, 2010 .- 584 с.: вкл.
2. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. / С.Э. Фриш. - С.-Пб.: "Лань", 2010. - 640 с. // <http://e.lanbook.com/view/book/625/>

7.3. Интернет-ресурсы:

сайт европейского оптического общества - <http://www.myeos.org/>

сайт кафедры теоретической физики КПФУ -

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

сайт международного общества оптики и фотоники - <http://spie.org/>

сайт Научной библиотеки им. Н. И. Лобачевского - http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=5056

сайт оптического общества (OSA) - <http://www.osa.org/en-us/home/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теория оптических спектров " предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и 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 "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.

Учебные аудитории для проведения лекционных и семинарских занятий.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Теоретическая и математическая физика .

Автор(ы):

Соловьев О.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Малкин Б.З. _____

"__" _____ 201__ г.