

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. Тагиров Л.Р.


КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(ДО КФУ)

_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Теоретические основы спектроскопии Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика сложных систем

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 No _____ от "_____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

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

Регистрационный No 6147417

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 (общекультурные компетенции) | способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу |
| ОПК-5 (профессиональные компетенции) | 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 (профессиональные компетенции) | способностью использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе) |
| ПК-1 (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 (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 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. Теория свободных атомов. | 1 | 1 | 2 | 0 | 0 | Устный опрос |
| 2. | Тема 2. 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 Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|-----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|-----------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные 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-j 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. Случаи 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 двухкратно 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. Псевдощелевые состояния.

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. Теория свободных атомов. | 1 | 1 | подготовка к устному опросу | 6 | устный опрос |
| 2. | Тема 2. 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 Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной 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 незаполненными 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 |
| | Итого | | | | 126 | |

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, родоначалное 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 Слетера 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. Фонновые 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 октаэдрических 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 магнито 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. Блини, 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

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
Программа расчета 3-j и 6-j 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 сложных систем .

Автор(ы):

Еремин М.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Тагиров Л.Р. _____

"__" _____ 201__ г.