

Федеральное государственное автономное образовательное
Учреждение высшего профессионального образования
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Проректор по образовательной деятельности
Мингарипов
20 г.



ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физические свойства и динамика молекул»

СД.ДС.Ф.7

Специальность: 010701.65 - Физика

Принята на заседании кафедры физики молекулярных систем

(протокол № 1 от "9" сентября 2014 г.)

Заведующий кафедрой физики молекулярных систем

В.Д. Скирда (В.Д. Скирда)

Утверждена Учебно-методической комиссией института физики КФУ

(протокол № 4 от "11" сентября 2014 г.)

Председатель комиссии

Д.А. Тагорский (Д.А. Тагорский)

Рабочая программа дисциплины “ Физические
свойства и динамика молекул ”

Предназначена для студентов 3 курса,
по специальности: Физика - 010701.65
(Название специальности)

АВТОР: Маклаков А.И., Фаткуллин Н.Ф.

КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ: в рамках дисциплины «Физические свойства и динамика молекул» систематически излагаются физические свойства молекул: геометрическая структура молекул, механические свойства, электрические и магнитные свойства.

1. Требования к уровню подготовки студента, завершившего изучение дисциплины “Физические свойства и динамика молекул”
наименование дисциплины

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины должны:

- понимать ознакомиться со структурой наиболее распространенных типов молекул;
- усвоить связь между структурой молекул и их свойствами.

2. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах).

Форма обучения - очная

Количество семестров 1

Форма контроля:

2 семестр - экзамен

№ п/п	Виды учебных занятий	Количество часов	
		1 семестр	2 семестр
1.	Всего часов по дисциплине		85
2.	Самостоятельная работа		34
3.	Аудиторных занятий		51
	в том числе лекций		51
	семинарских (или лабораторно-практических)		

3. Содержание дисциплины.

3.1. ТРЕБОВАНИЯ ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО СТАНДАРТА К ОБЯЗАТЕЛЬНОМУ МИНИМУМУ СОДЕРЖАНИЯ ПРОГРАММЫ

Индекс	Наименование дисциплины и ее основные разделы	Всего часов
СД,ДС.Ф. 7	Физические свойства и динамика молекул	85

Примечание: Если дисциплина, устанавливается вузом самостоятельно, то в данной таблице ставится прочерк.

3.2. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов		
		лекции	(лаб.- прак г.)	самостоя- тельная работа
1	Введение, цель курса. Определение молекулы, её устойчивость. История изучения молекул. Уравнения Максвелла, волновое уравнение, поляризованное излучение.	4		4
2	Электрические моменты молекул: дипольный, квадрупольный. Индуцированный дипольный момент, поляризуемость молекулы. Магнитный дипольный момент; магнитный момент молекулы, восприимчивость. Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.	6		4
3	Геометрические характеристики молекул. Размеры молекул как шаров. Равновесная конфигурация молекулы, ядерный, скелет двух-, трех- и четырехатомных молекул. Ядерный скелет молекул углеводов, насыщенных и ненасыщенных. Характеристики ядерного скелета: длина хим. связей, валентные углы, атомные радиусы. Пространственное строение молекул, молекулярный радиус. Модели молекул Стюарта-Бриггеба. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.	6		4
4	Внутреннее вращение в молекулах. Поворотная изомерия этана и 1,2-дихлорэтана. Поворотные изомеры углеводов и полимеров, времена жизни изомеров. Механические свойства молекул. Динамика изолированной частицы, n частиц. Вращение n связанных частиц. Тензор момента инерции, классификация молекул по этому тензору. Внутренние колебания в молекулах. Гармонический осциллятор, двухатомная молекула. Уравнения Лагранжа, Обобщенные координаты. Колебания многоатомных молекул. Секулярное уравнение, нормальные колебания.	6		4
5	Электрические свойства молекул, их структура и динамика. Классический подход. Энергия молекул во внешних полях. Уравнения Клаузиуса-Мосотти и Лорентц-Лоренца для неполярных молекул. Ориентационная (дипольная) поляризация. Уравнения Ланжевена-Дебая. Дипольные моменты, структура и внутреннее вращение. Закон аддитивности для дипольных моментов молекул. Молекула в переменном электрическом поле, её динамика. Уравнения Дебая, кривые поглощения и дисперсии. Представление Коула-Коула. Спектр времен релаксации. Соотношения Кронига-Крамерса, Время диэлектрической релаксации Дебая.	6		4
6	Магнитные свойства молекул и их структура. Диамагнетизм и парамагнетизм. Диамагнетизм Ланжевена. Формула диамагнитной восприимчивости Ван-Флека. Магнето-химическая схема Паскаля и структура молекулы.	6		4
7	Некоторые сведения из квантовой механики. Операторы, их свойств эрмитовы операторы, собственные значения и функции. Свойства эрмитовых операторов.	8		4

	<p>Постулаты квантовой, механики: замена фйз. величин на операторы, уравнение Шредингера, стационарные состояния, суперпозицион. состояние, среднее значение наблюдаемой величины. Физ. смысл волновой функции. Матричные элементы операторов и их временная зависимость. Теория возмущений, зависящих от времени.</p> <p>Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: а) электрическое дипольное, б) магнитное дипольное, в) электрическое квадрупольное взаимодействия. Правила отбора.</p> <p>Модельные квантово-механические задачи: а) частица на окружности б) внутреннее вращение.</p>			
8	<p>Макромолекулы, их типы. Идеальная полимерная цепь. Свободно-сочлененная цепь, гибкость полимерной цепи. Цепь с фиксированным валентным углом. Идеальная цепь как случайное блуждание.</p> <p>Самодиффузия молекул и тензор коэффициента самодиффузии.</p>	9		6
	Итого часов:	51		34

Основная литература

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : Учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. – 2-е изд. (эл.). – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний. – 2012.–496 с. – Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150
2. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / Каплан И.Г. пер. с англ. – Электронный ресурс. – 2012. – 394 стр. – ISBN: 978-5-9963-1385-3. Издательство "Бином. Лаборатория знаний". Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8690
3. Высокомолекулярные соединения : Учебник / Кленин В.И., Федусенко И.В. – Издание 2-ое исправленное. – 2013. – 512 стр. – ISBN: 978-5-8114-1473-4. Издательство «Лань». – Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=5842

Дополнительная литература

1. Курс общей физики : Учебное пособие. В 3-х тт. Т.3. Оптика. Физика атомов и молекул. Физика атомного ядра и микрочастиц. 6-е изд., стер. / Зисман Г.А., Годес О.М. – Издательство “Лань”, 2007. – 512 с. – Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=508
2. Специальные функции. Производные, интегралы, ряды и другие формулы. Справочник. / Брычков Ю.А. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 512 с. – Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=48182

Интернет-ресурсы

1. Волновая теория механики атомов и молекул. Э. Шредингер.,
<http://ufn.ru/ru/articles/1927/3/c/>.
2. Лекции по квантовой химии. Уфимское квантовохимическое общество,
<http://www.qchem.ru/lectures/>.
3. Основы химии. Интернет-учебник., <http://www.hemi.nsu.ru/index.htm>.
4. Физическая энциклопедия. Молекула.,
http://www.femto.com.ua/articles/part_1/2328.html.
5. Эффективные операторы в теории строения электронных оболочек молекул,
<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/zajzevskii/welcome.html>

Приложение к программе дисциплины
“Физические свойства и динамика молекул”

БИЛЕТЫ

к спецкурсу "Физические свойства и динамика молекул"

Билет 1

1. Электрические моменты молекул: монопольный, дипольный, квадрупольный.
2. Квантовомехан. задачи: частица на окружности.

Билет 2

1. Магнитный дипольный момент; магнитный момент молекулы, магнитная восприимчивость.
2. Магнитные элементы операторов и их временная зависимость.

Билет 3

1. Тензоры магнитной восприимчивости и поляризуемости молекулы.
2. Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: магнитное дипольное взаимодействие.

Билет 4

1. Геометрические характеристики молекулы. Примеры.
2. Полуклассическая теория взаимодействия частиц с электромагнитным излучением: электрическое дипольное взаимодействие.

Билет 5

1. Внутреннее вращение в молекулах 1,2-дихлорэтана, УВ и полимеров.
2. Среднее значение наблюдаемой величины в квантовой механике.

Билет 6

1. Вращение связанных частиц. Тензор момента инерции, классификация молекул по тензору.
2. Теория возмущения, зависящего от времени.

Билет 7

1. Внутренние колебания многоатомных молекул. Секулярное уравнение, нормальные колебания.
2. Диамагнетизм Ланжевена. Магнито-химическая схема Паскаля и структура молекулы.

Билет 8

1. Ориентационная поляризация молекул, уравнения Ланжевена-Дебая.
2. Пространственное строение молекул, молекулярный радиус. Модели молекул. Аддитивная схема для подсчета объема молекул.

Билет 9

1. Молекула в переменном электрическом поле. Уравнения Дебая, кривые поглощения и дисперсии.
2. Уравнение Шредингера, стационарные состояния.

Билет 10

1. Дипольные моменты молекул, связь со структурой и внутренним вращением. Закон аддитивности для дипольных моментов.
2. Эрмитовы операторы и их свойства.

Контроль остаточных знаний: качественное знание всех вопросов и программы.