

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Дополнительные главы квантовой механики молекул

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Физическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Дополнительные главы квантовой механики молекул**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Знать: теоретические основы современных методов спектроскопического исследования структуры и свойств веществ Уметь: выбирать направление теоретического исследования, адекватное поставленной задаче Уметь: применить теоретические основы современных спектроскопических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему
СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	Знать: основные теоретические концепции и подходы квантовой механики молекул, используемые при моделировании электронно-колебательных (вибронных) переходов, и границы их применимости Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы Владеть: первичными навыками качественного объяснения и предсказания колебательной структуры полос электронных переходов, а также их температурной зависимости на основе известных простых аналитических моделей

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 68 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основы классической и квантовой механики, квантовой химии и строения молекул.

Уметь: применять стандартные методы алгебры и анализа для решения конкретных задач, формулировать и решать простейшие задачи на основе усвоенных законов и закономерностей.

Владеть: простейшим математическим аппаратом и навыками решения типовых задач квантовой механики молекул.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Общая формулировка электронно-ядерной задачи.	13	2	2				4	9		9
Тема 2. Вибронные (электронно-колебательные) переходы.	20	2	4				6	14		14
Тема 3. Простые модели вибронных спектров.	16	2	2				4	12		12
Тема 4. Модели вибронных	20	2	4				6	14		14

спектров с учетом температурных эффектов.										
Тема 5. Многомодовые гармонические модели спектров.	6	4	2				6	0		0
Тема 6. Динамика волновых пакетов.	16	4	2				6	10		10
Тема 7. Моменты спектра.	15	2	2	2			6	9		9
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	108	18	18	2		2	40	68		68

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и по ходу занятий, наборы заданий для самостоятельной работы. По теме каждого занятия указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Берсукер И.Б., Полингер В.З. Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. – М.: "Наука," 1983.
2. Медведев Э.С., Ошеров В.И. Теория безызлучательных переходов в многоатомных молекулах. – М.: "Наука," 1983.
3. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. – М.: Изд-во МГУ, 1991.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том II. Теория поля. – М.: Наука, 1988.

5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1989.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Ч. 1. – М.: Наука. Физматлит, 1989.

Дополнительная литература

1. Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и спектроскопия. М.: Мир, 2004.
2. Васильев А.Н., Михайлин В.В. Введение в спектроскопию диэлектриков. Часть I. - М.: НИИЯФ МГУ, 2008.
3. Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены. М.: Наука, 1976.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

с.н.с., к.ф.-м.н. Щербинин Андрей Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ;
e-mail: scherb@classic.chem.msu.su

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачёта. На зачёте проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета:

1. Молекулярный гамильтониан. Адиабатическое и статическое представление электронно-колебательной задачи, вибронные гамильтонианы. Адиабатические приближения (обычное и «грубое»), приближенные вибронные состояния. молекул и конденсированных сред. Связь статического и адиабатического представления, разложение Герцберга–Теллера, применимость адиабатического приближения при квазивырождении электронных состояний. Случай близких по энергии электронных состояний (двухуровневая модель).
2. Излучательные и безызлучательные переходы, их механизмы. Теория возмущений для эволюционных задач, «Золотое правило Ферми» при постоянном и при монохроматическом возмущении. Излучательные процессы первого порядка. Полуклассическая теория излучательных переходов, дипольное приближение, «Золотое правило Ферми» для дипольных переходов.
3. Приближение Кондона, факторы Франка-Кондона (ФК). Гармоническая модель потенциальных поверхностей, одномодовая модель, модель линейной вибронной связи. Энергия бесфононного перехода, энергия реорганизации, параметр Хуанга-Рис.
4. Нормированный спектр с учетом температуры, характеристическая функция поглощения, формула Лакса. Матрица плотности в координатном представлении, матрица плотности гармонического осциллятора, её статистический смысл.
5. Характеристическая функция спектра поглощения в одномерной гармонической модели с линейной связью (формула Лакса).

6. Вывод и качественное обсуждение «полуклассического» спектра в одномерной модели линейной связи.
7. Формула Хуанга-Рис-Пекара, качественное обсуждение влияния температуры на вид спектра.
8. Приведенная характеристическая функция. Сведение приведенной характеристической функции к произведению одномодовых выражений, свертка нормированных спектров. Примеры свертки двух пуассоновских спектров с фиксированным соотношением частот и меняющимися параметрами Хуанга-Рис.
9. Иллюстрация типичного механизма уширения экспериментально наблюдаемых вибронных линий в многоатомных молекулах и конденсированных средах (механизм «мягких колебаний»).
10. Квантовая динамика: общая формулировка задачи, явный вид решений для одномерной гармонической модели с линейной связью. Гауссов волновой пакет, вывод и качественное обсуждение решения. Связь характеристической функции спектра в пределе нулевой температуры с автокорреляционной функцией волнового пакета. Иллюстрации для одномодового и двумодового случая. Иллюстрация соотношений неопределенностей.
11. Общее определение моментов спектра. Выражение через характеристическую функцию. Нулевой, первый и второй момент спектра. Дисперсия и полная ширина спектральной полосы на половине высоты. Вычисление моментов спектра для гармонической модели с линейной связью. Иллюстрация спектральных моментов для модельных вибронных полос. Дисперсия вибронной полосы на примере «полуклассического» спектра, эффект температурного уширения полосы поглощения

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: теоретические основы современных методов спектроскопического исследования структуры и свойств веществ</p> <p>Знать: основные теоретические концепции и подходы квантовой механики молекул, используемые при моделировании электронно-колебательных (вибронных) переходов, и границы их применимости</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь: выбирать направление теоретического исследования, адекватное поставленной задаче</p> <p>Уметь: применить теоретические основы современных спектроскопических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: первичными навыками качественного объяснения и предсказания колебательной структуры полос электронных переходов, а также их температурной зависимости на основе известных простых аналитических моделей</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>