

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/

«21» июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Теория электронно-колебательных переходов

Уровень высшего образования:
Подготовка кадров высшей квалификации

Направление подготовки (специальность):
04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия 02.00.04

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №4 от 03.06.2015)

Москва 2015

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 04.06.01 «Химические науки» на основе Образовательного стандарта, самостоятельно установленного МГУ имени М.В.Ломоносова (далее – ОС МГУ), утвержденного Приказом № 552 от 23.06.2014 г. по МГУ с учетом изменений в ОС МГУ, внесенных Приказом №831 по МГУ от 31.08.2015 г..

Год (годы) приема на обучение

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

1. Наименование дисциплины (модуля): **Теория электронно-колебательных переходов**

Курс посвящён рассмотрению и обсуждению различных моделей электронно-колебательных переходов и спектров молекул. Детально обсуждаются базовые концепции и формализмы, применяемые при теоретическом исследовании электронно-колебательных состояний и переходов, аналитические модели контуров спектральных полос и причины их температурного уширения. Рассматриваются механизмы разрешённых и запрещённых переходов, а также особенности нелинейных оптических явлений на примере двухфотонных процессов. Обсуждаются современные подходы к моделированию электронно-колебательных спектров на основе первых принципов. Материал курса будет полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальностям 02.00.04 – физическая химия, а также 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

2. Уровень высшего образования – аспирантура.

3. Направление подготовки: **04.06.01 Химические науки**. Направленность: Физическая химия.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок «Дисциплины (модули)»

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-2 Способен проводить расчетно-теоретические исследования физико-химической направленности с использованием современного программного обеспечения	Знать: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее распространённых моделей электронно-колебательных переходов и спектров молекул Уметь выбрать технологию моделирования положения, интенсивности и структуры полосы электронно-колебательного перехода, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и интерпретировать полученные результаты Уметь оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных по моделированию электронно-колебательных спектров, в том числе, с использованием расчётов из первых принципов

6. Объем дисциплины (модуля) 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 часов, из которых 50 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов групповые консультации, 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 58 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

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

Для успешного освоения дисциплины и формирования компетенций слушателями в специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», «Классическая механика», «Квантовая механика», «Квантовая химия», «Строение 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. Стационарные состояния	14	6		2			8	6		6

молекул, переходы, их механизмы и классификация										
Тема 2. Модели электронно-колебательных переходов в приближении Кондона	42	18		2		2	22	10	10	20
Тема 3. Запрещённые переходы, их классификация и механизмы	14	6		2			8	6		6
Тема 4. Двухфотонные переходы, их классификация, механизмы и модели спектров	26	6		2		2	10	6	10	16
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	12					2	2			10
Итого	108	36	0	8	0	6	50	28	20	58

9. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

Литература для углубленного изучения

1. Ballhausen, C.J., and Hansen A.E. Electronic spectra. Ann. Rev. Phys. Chem. v.23, pp.15-38 (1972)
2. Azumi, T., and Matsuzaki, K. What does the term "vibronic coupling" mean? Photochem. Photobiol. v.25 pp.315-26 (1977)
3. Cederbaum, L. S. The multistate vibronic coupling problem. J. Chem. Phys. V. 78, p.5714 (1983) – Sect. II
4. Toptygin D. Effects of the Solvent Refractive Index and Its Dispersion on the Radiative Decay Rate and Extinction Coefficient of a Fluorescent Solute. Journal of Fluorescence. 2003. V.13. N.3. p.201-219.

5. Keil T.H. Shapes of impurity absorption bands in solids. // Phys. Rev. A. V. 140. p. 601–617 (1965).
6. Markham J.J. Interaction of normal modes with electron traps. // Rev. Mod. Phys. V. 31. p. 956–989 (1959)
7. Lax M. The Franck-Condon Principle and Its Application to Crystals. // J. Chem. Phys. V.20. p. 1752–1761 (1952).
8. O'Rourke R.C. Absorption of Light by Trapped Electrons. // Phys. Rev. V.91. p. 265–270 (1953).
9. Barone F. A., Boschi-Filho H., and Farinac C. Three methods for calculating the Feynman propagator. //Am. J. Phys. V.71. p. 483–491 (2003).
10. Watson G.N. Notes on generating functions of polynomials: (2) Hermite polynomials. //J. London Math. Soc. V.8. p. 194–199 (1933).
11. Heller E.J. Quantum corrections to classical photodissociation models // J. Chem. Phys. V.68. p. 2066–2075 (1978).
12. Heller E.J. The Semiclassical Way to Molecular Spectroscopy // Acc. Chem. Res. V. 14. p. 368–375 (1981)
13. Heller E.J. Guided Gaussian Wave Packets // Acc. Chem. Res. V. 39. p. 127–134 (2006)
14. Tannor D.J., Heller E.J. Polyatomic Raman scattering for general harmonic potentials // J. Chem. Phys. V. 77. p. 202–218 (1982).

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.
7. Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и спектроскопия. М.: Мир, 2004.
8. Васильев А.Н., Михайлин В.В. Введение в спектроскопию диэлектриков. Часть I. - М.: НИИЯФ МГУ, 2008.

Дополнительная литература

1. Лонге-Хиггинс Г. Современные достижения теории энергетических уровней молекул. -- УФН, т. 83 с.137–170 (1964)
2. Перлин Ю.Е. Современные методы теории многофононных процессов. – УФН, т. 80. С. 553–595 (1963).

- Материально-техническое обеспечение: занятия проводятся в обычной аудитории с возможностью подключения техники для демонстрации презентаций

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватель:

Щербинин Андрей Владимирович, кандидат физико-математических наук, ст. научн. сотр. кафедры физической химии Химического факультета МГУ; e-mail: scherb@classic.chem.msu.su

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций приведены в п.5
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.
 - Образцы заданий для промежуточного контроля усвоения материала (зачета)
 1. Вывести разложение Герцберга-Теллера с точностью до членов второго порядка по колебательным смещениям.
 2. Вывести формулу «золотого правила» Ферми, предполагая, что периодическое возмущение адиабатически включается от момента $t = -\infty$ по закону $\exp(\lambda t)$, где $\lambda > 0$ – параметр, и в конце вычислений перейти к пределу $\lambda \rightarrow 0$.
 3. Исследовать точное (т.е. без использования теории возмущений) поведение нестационарных состояний двухуровневой модельной системы при воздействии монохроматического возмущения с частотой, близкой к резонансу.
 4. Вычислить факторы Франка-Кондона для вибронных переходов общего вида $n \rightarrow m$ в линейной гармонической модели.
 5. Вывести распределение интенсивностей запрещённого (некондоновского) спектра переходов $0 \rightarrow m$ в линейном одномодовом приближении (электронный момент перехода вида $W_{ab}(Q) = BQ$, B – коэффициент). Отдельно рассмотреть случай отсутствия смещения верхнего и нижнего терма ($\Delta Q=0$).
 6. Разобрать хотя бы один способ вывод формулы Мелера.
 7. Вывести уравнение модели Хуанга-Рис-Пекара методом прямого суммирования ряда из термически взвешенных факторов Франка-Кондона.
 8. Решить задачу об эволюции гауссова волнового пакета в гармоническом потенциале, пользуясь формулой разложения производящей функцией для полиномов Эрмита.
 9. Показать, что «полуклассическая» формула спектра правильно предсказывает спектральные моменты вплоть до 2-го порядка, но не моменты более высоких порядков.
 10. Объяснить механизм снятия запрета по спине.
 11. Описать механизмы снятия запрета по симметрии.
 12. Вывести рабочие формулы для сечения двухфотонного поглощения.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится в форме доклада (презентации) с последующим обсуждением. Также аспирант может представить доклад на основе собственной работы. Но такой доклад должен иметь существенную методическую ценность, т.е. примеры из своей работы могут быть использованы только для иллюстрации или представления общих методов и подходов.

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 \ Результат	2	3	4	5
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