

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра квантової радіофізики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2017_ р.

Програма навчальної дисципліни

МОЛЕКУЛЯРНА СПЕКТРОСКОПІЯ

(назва навчальної дисципліни)

спеціальність (напрямок) _ 105 Прикладна фізики та наноматеріали (радіофізика, біофізика)

факультет _ радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

2017_ / 2018_ навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Протокол від “ 21 ” червня 2017 року № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: (вказати авторів, їхні наукові ступені, вчені звання та посади)
професор кафедри квантової радіофізики, д.ф. - м.н. Баскаков Олег Ігорови

Програму схвалено на засіданні кафедри квантової радіофізики

Протокол від “ 21 ” червня 2017 року № 10

Завідувач кафедри квантової радіофізики

_____ проф. Маслов В.О.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Протокол від “ 16 ” червня 2017 року № 6

Голова методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

_____ (проф. Черногор Л. Ф.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Молекулярна спектроскопія” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки
бакалавр
 (назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

спеціальності (напряму) 6.040204 - Прикладна фізика (радіофізика і електроніка)
 спеціалізації

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є дати студентам сучасне уявлення про основні теоретичні положення і напрямки розвитку молекулярної спектроскопії, про її місце в загальній системі наукових знань і її застосуванні.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є засвоєння студентами засад молекулярної спектроскопії та способів її використання в промисловості і науці.

1.3. Кількість кредитів – 6

1.4. Загальна кількість годин – 180

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

За вибором
Денна форма навчання
Рік підготовки
4-й
Семестр
8-й
Лекції
48 год.
Практичні, семінарські заняття
48 год.
Лабораторні заняття

Самостійна робота
84 год.
Індивідуальні завдання

1.6. Заплановані результати навчання

Знати:

- як в адіабатичному наближенні розділити рух електронів і ядер, а ядерний рух, у свою чергу, на обертальний та коливальний;

- структуру обертальних рівнів енергії молекул різного типу в наближенні жорсткого вовчка;
- алгебраїчну теорію кутового моменту;
- теорію нормальних коливань багатоатомних полу-жорстких молекул з погляду класичної фізики та квантової механіки;
- спектроскопічні позначення рівнів енергії молекул;

Уміти:

- вивести вираз для ймовірностей переходів, як за допомогою теорії збурювань, так і в наближенні дворівневої системи;
- пояснити поведінку квантової системи під дією зовнішнього монохроматичного електромагнітного поля;
- розраховувати обертальну енергію молекул різного типу, як аналітично, так і чисельно;
- розраховувати коливальну енергію полу-жорстких молекул;
- побудувати матрицю кінематичних коефіцієнтів коливальної молекули в різних типах координат;

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Коливальні рухи багатоатомної молекули.

Тема 1. Вступ до курсу. Коротка історія. Головні задачі.

Тема 2. Адіабатичне наближення. (Наближення Борна - Оппенгеймера). Поділ електронного і ядерного рухів. Функції потенційної енергії ядер. Рівноважна конфігурація. Основний та збуджені електронні стани. Порядок енергій електронного, коливального й обертового рухів. Енергетична діаграма двохатомної молекули. Позначення електронних станів.

Тема 3. Коливання молекул з погляду класичної механіки. Наближення малих коливань, гармонійне наближення. Вигляд потенційної функції в наближенні малих коливань. Функція Лагранжа й рівняння Лагранжа. Узагальнені координати - декартові зсуви ядер. Виведення рівнянь руху у звичайному та у матричному вигляді. Матриця силових постійних і її властивості. Нормальні координати. Послідовність переходу від декартових зсувів до нормальних координат. Ортогональність нормальних координат. Геометричний зміст окремих етапів переходу від декартових зсувів до нормальних координат. Розв'язання рівнянь руху в нормальних координатах. Нормальні коливання. Рух ядер молекули. Форма нормальних коливань. Загальний алгоритм визначення частот і форм нормальних коливань. Коливання з нульовою частотою. Доказ їхнього існування. Кількість дійсних нормальних коливань у лінійних і нелінійних молекул. Внутрішні координати. Три головних переваги використання внутрішніх координат перед декартовими зсувами. Зв'язок внутрішніх координат з декартовими зсувами. Зміст векторів зв'язку \vec{S}_{ii} . Матриця кінематичних коефіцієнтів. Рівняння руху у внутрішніх координатах.

Тема 4. Коливання молекул з погляду квантової механіки. Рівняння Шредінгера, що описує коливання багатоатомної молекули. Гармонійне наближення. Перехід до нормальних координат. Поділ змінних. Енергія молекули, що коливається. Одномірний гармонійний осцилятор. Комутаційні співвідношення між різними операторами. Оператори підвищення, зниження. Вираз гамільтоніану через оператори підвищення - зниження. Доказ рівно дистанційності енергетичного спектра. Існування нижнього рівня. Енергія нижнього рівня. Одержання виразу для власних функцій гармонійного осцилятора. Графіки і властивості власних функцій гармонійного осцилятора. Матриці

операторів підвищення, зниження, p і q у базисі власних функцій гармонійного осцилятора. Діаграмна техніка обчислення матричних елементів добутку ступенів p і q у базисі власних функцій гармонійного осцилятора. Правила відбору в коливальних спектрах багатоатомних молекул. Структура коливальних рівнів енергії багатоатомної молекули. Позначення коливальних станів.

Розділ 2. Обертальні рухи багатоатомної молекули.

Тема 5. Квантово-механічний гамільтоніан твердого вовчка. Зсув $\Delta\bar{r}$ крапки при нескінченно малому повороті $\Delta\bar{\alpha}$. Визначення вектора кутової швидкості. Класичне вираз для кінетичної енергії твердого тіла з використанням кутової швидкості. Кількість ступенів волі обертального руху. Тензор моменту інерції. Його властивості. Головні осі тензора моменту інерції. Лабораторна й молекулярна системи координат. Матрична форма класичного виразу для кінетичної енергії твердого тіла. Перехід від виразу для кінетичної енергії твердого вовчка до гамільтоніану. Узагальнені імпульси. Доказ, що узагальнений імпульс, сполучений кутової швидкості, є момент імпульсу обертального тіла. Квантування гамільтоніану. Принцип відповідності. Оператор кутового моменту. Квантово-механічний гамільтоніан твердого вовчка в головних осях тензору моменту інерції. Обертальні постійні.

Тема 6. Алгебраїчна теорія кутового моменту. Виведення комутаційних співвідношень між компонентами оператора кутового моменту щодо лабораторної системи координат. Оператор квадрата кутового моменту. Теорема про власні функції комутуючих операторів. Оператори підвищення й зниження. Доказ виродженості власних значень оператора J^2 й різниці на ціле число власних значень операторів J_z, J_x, J_y . Замкнений підпростір функцій щодо дій операторів кутового моменту утворений виродженими власними функціями оператора J^2 . Доказ спряженості операторів J_+ і J_- . Виведення формули для власних значень операторів J^2 і J_z . Діапазон змін власних значень. Пояснення, чому напів цілі значення j є неприпустимими в задачах про обертання молекул. Виведення виразів для матричних елементів операторів J_+ і J_- в базисі власних функцій операторів J^2 і J_z . Структура матриць компонент оператора кутового моменту J_z, J_x, J_y й квадрата оператора кутового моменту J^2 в базисі власних функцій операторів J^2 і J_z . Блоково діагональний вигляд матриць. Вигляд матриць у власному базисі. Дія оператора кутового моменту на направляючі косинуси. Комутаційні співвідношення між компонентами оператора кутового моменту в молекулярній системі координат. Ті ж співвідношення між компонентами в молекулярній і лабораторній системах координат. Застосування алгебраїчної теорії кутового моменту до оператора кутового моменту щодо молекулярної системи координат. Компоненти оператора кутового моменту як похідні по кутах повороту.

Тема 7. Властивості обертальних станів багатоатомних молекул. Поняття квантових чисел. Незалежність енергії від квантового числа M . Фізичний зміст даного явища. Кратність виродження по квантовому числу M . Фізичний зміст власних значень різних операторів кутового моменту. Класифікація твердих вовчків і їхні рівні енергії. Сферичний вовчок. Витягнутий й сплюснений симетричні вовчки. Виродженість енергії по квантовому числу K . Молекула типу асиметричного вовчка. Параметр асиметрії. Поводження рівнів енергії залежно від асиметрії молекули. Псевдо квантові числа k_-, k_+ . Блоково діагональна структура матриці гамільтоніану твердої молекули, що обертається.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин					
	денна форма					
	усьог о	у тому числі				
л		п	лаб.	інд.	с. р.	
1	2	3	4	5	6	7
Розділ 1. Коливальні рухи багатоатомної молекули.						
Тема 1. Вступ до курсу. Коротка історія. Головні задачі.	2	2				2
Тема 2. Поділ електронного і ядерного рухів.	10	4	2			4
Тема 3. Коливання молекул з погляду класичної механіки.	56	12	22			22
Тема 4. Коливання молекул з погляду квантової механіки.	28	10	4			14
Разом за розділом 1	96	28	28			42
Розділ 2. Обертальні рухи багатоатомної молекули.						
Тема 5. Квантово-механічний гамільтоніан твердого вовчка.	16	4	2			10
Тема 6. Алгебраїчна теорія кутового моменту.	24	8	4			12
Тема 7. Властивості обертальних станів багатоатомних молекул.	44	8	14			20
Разом за розділом 2	84	20	20			42
Усього годин	180	48	48			84

4. Темі практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Адіабатичне наближення.	2
2	Коливання з нульовою частотою.	2
3	Внутрішні координати.	4
4	Розрахунок коливальних частот і форм нормальних коливань молекули води.	16
5	Матриці операторів q і p і їхніх ступенів у базисі одномірного гармонійного осцилятора.	2
6	Вплив ангармонійності на рівні енергії одномірного осцилятора.	2
7	Матриці операторів кутового моменту й гамільтоніан твердого вовчка в базисі функцій симетричного вовчка.	2
8	Комутаційні співвідношення операторів кутового моменту в молекулярній системі координат.	2
9	Центробіжні додатки до обертального гамільтоніану.	2
10	Розрахунок рівнів енергії й частот переходів молекули типу	14

	асиметричного вовчка.	
	Разом	48

Лабораторні роботи не заплановані.

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Адіабатичне наближення.	4
2	Електронні стани двохатомної молекули.	4
3	Комутаційні співвідношення для компонент оператора кутового моменту у лабораторній та молекулярній системі координат.	4
4	Алгебраїчна теорія кутового моменту.	8
5	Квантово-механічний гамільтоніан твердого вовчка.	4
6	Обертальні стани багатоатомних молекул. Обертальні квантові числа.	6
7	Коливання молекул з погляду класичної механіки.	10
8	Коливання молекул з погляду квантової механіки.	10
9	Інтенсивність і правила відбору в коливальних спектрах багатоатомних молекул.	4
10	Інтенсивність і правила відбору в лінійних молекулах і молекулах типу симетричного вовчка. Облік ядерної статистики.	6
11	Використання спектроскопічних методів для моніторингу атмосфери Землі.	4
12	Дослідження космічного простору за допомогою методів молекулярної спектроскопії.	4
13	Спектроскопія в хімічному аналізі.	4
14	Визначення геометричної структури молекул.	4
15	Методи експериментального дослідження коливальних спектрів молекул.	4
16	Методи експериментального дослідження обертальних спектрів молекул.	4
	Разом	84

6. Індивідуальні завдання

Індивідуальні завдання не заплановані.

7. Методи контролю

Бали по кожній темі нараховуються з урахуванням опитування кожного студента по раніше пройденому матеріалу на початку заняття, виконанню домашніх завдань і розв'язуванню задач на практичних заняттях і участю у семінарах. Перед заліком і екзаменом студент повинен мати зошит з усіма задачами, які розв'язувались в аудиторії та вдома.

10. Розподіл балів, які отримують студенти

8-й семестр. Екзамен.

Поточний контроль та самостійна робота							Екзамен	Сума
Розділ 1				Розділ 2				
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	40	100
4	4	20	4	4	4	20		

T1, T2 ... – теми розділів.

9. Рекомендована література

Основна література

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. – М.: Наука, 1962. – 892 с.
2. Вильсон Е., Дешиус Дж., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул: Пер. с англ. – М.: Наука, 1960. – 357 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.Н. Квантовая механика. – М.: Наука, 1963. – 704 с.
4. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М. Наука, 1973. – 793 с.
5. Таунс Ч., Шавлов А. Радиоспектроскопия. – М.: ИЛ, 1959. – 756 с.

Допоміжна література

1. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию: Учеб. Пособие. – 2-е изд. испр. и доп. Л.: Изд-во Ленингр. Ун-та, 1987. – 216 с.
2. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. – М.: Мир, 1981. – 456 с.
3. Горди В., Смит В., Трамбаруло Р. Радиоспектроскопия. – М.: Гостехиздат, 1955. – 448 с.
4. Стрендберг М. Рдиоспектроскопия. – М.: ИЛ, 1956. – 195 с.
5. <http://cordon.in.ua/> - лекції.