

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«Кубанский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «КубГУ»)



Рабочая программа дисциплины

Б1.В.ОД.5 Спектроскопия кристаллов

для подготовки аспирантов

Направление
03.06.01 Физика и астрономия

Профиль 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Очная форма обучения

Краснодар
2016

Программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, утвержденными 30 июля 2014 г. № 867, зарегистрированный в Министерстве юстиции Российской Федерации 25.08.2014 г. № 33836

Автор(ы):  В.А. Исаев, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры физики и информационных систем физико-технического факультета ФГБОУ ВО «КубГУ»

Рецензент(ы):  Тумаев Е.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и компьютерных систем физико-технического факультета ФГБОУ ВО «КубГУ»

Программа одобрена на заседании кафедры физики и информационных систем от «23» мая 2016 года, протокол № 17.

Одобрено на заседании учебно-методической комиссии физико-технического факультета «23» мая 2016 г., протокол № 5

Подписи:

Зав. кафедрой



Н.М. Богатов

Декан

физико-технического факультета



Н.А. Яковенко

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Учебная дисциплина "Спектроскопия кристаллов" ставит своей целью изучение свойств конденсированных сред спектроскопическими методами. Изучаются механизмы формирования оптических центров, схемы расщепления и структура уровней для примесных ионов переходных металлов и редкоземельных элементов.

Задачи дисциплины:

Основные задачи дисциплины – обучение аспирантов методам расчета и анализа оптических спектров примесных ионов в конденсированных средах, а также ознакомление с современным состоянием проблемы.

Для успешного овладения материалом курса необходимы знания из атомной физики, квантовой механики, теории симметрии, в том числе теории дискретных и непрерывных групп.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

«Спектроскопия кристаллов» является обязательной дисциплиной аспирантуры направления 01.04.07 – "Физика конденсированного состояния". Изучение спектроскопических свойств конденсированных сред базируется на знаниях аспирантов, полученных ранее при изучении дисциплин, входящих в цикл общей физики.

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

знать:

- основные законы, идеи и принципы спектроскопии конденсированных сред, их становление и развитие в исторической последовательности, их математическое описание, их экспериментальное исследование и практическое использование;

иметь:

- четкие представления о современных научных концепциях спектроскопии конденсированных сред;
- навыки применения полученных теоретических знаний для решения прикладных задач;

уметь:

- осмысливать и интерпретировать основные положения спектроскопии конденсированных сред, оценивать порядки физических величин, использовать полученные знания в различных областях физической науки и техники.

Формируемые компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с

использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

– готовность выбирать, осваивать и совершенствовать методы выращивания и исследования кристаллов и растворов (ПК-1);

– владеть теоретическими и экспериментальными методами исследования природы кристаллических и аморфных веществ в твердом и жидком состояниях и изменения их свойств при различных внешних воздействиях (ПК-2).

4. Содержание и структура дисциплины «Спектроскопия кристаллов»

4.1. Содержание разделов дисциплины

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	КСР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Основы атомной спектроскопии Атом водорода. Волновые функции и уровни энергии. Оператор углового момента. Операторы повышения и понижения. Квантовые числа. Водородоподобные атомы. Спин-орбитальное взаимодействие. Многоэлектронные атомы. <i>LS</i> - и <i>JJ</i> -связь. Эквивалентные электроны. Волновые функции конфигурации эквивалентных электронов. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов. Параметры электростатического взаимодействия		4	4	–	4

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	КСР	
2.	Теория симметрии. Операторы симметрии. Точечная группа. Порядок группы. Классы группы. Таблица умножения группы. Базис группы. Представления, их характеры. Неприводимые и приводимые представления. Точечные группы высокой, средней и низкой симметрии. Группы октаэдра и тетраэдра. Четные и нечетные представления. Прямое произведение представлений. Двойные группы и двузначные представления. Углы Эйлера.		4	4	—	4
3.	Теория кристаллического поля. Кристаллическое поле. Слабое и сильное поле. Построение волновых функции из соображений симметрии. <i>d</i> -электрон в кубическом поле. Сила кристаллического поля. Поле в октаэдре, кубе, тетраэдре. Многоэлектронные атомы; их волновые функции в приближении сильного и слабого поля. Спин-орбитальное взаимодействие в кристаллическом поле. Диаграммы Танабе-Сугано. Спектры примесных атомов группы железа		4	4	—	4

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	КСР	
4.	Электронно-колебательное взаимодействие. Адиабатическое приближение. Борн-Оппенгеймеровская запись волновой функции электронов и ядер. Классический, полуклассический и квантовый принцип Франка-Кондона. Приближение Кондона. Квазилинейчатые электронно-колебательные спектры примесных атомов. Бесфононные линии. Распределение интенсивностей в электронно-колебательной полосе. Локальные, квазилокальные и кристаллические колебания. Фактор Дебая-Уоллера.		4	4	—	4
5.	Эффекты Яна-Теллера. Теорема Яна-Теллера. Взаимодействие вырожденного электронного состояния с вырожденными колебаниями. Поверхности адиабатического потенциала. Статический и динамический эффекты Яна-Теллера. Роль случайных деформаций. Ян-теллеровские расщепления полос в оптических спектрах. Фактор вибронной редукции.		4	4	—	4

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	КСР	
6.	Люминесценция примесных ионов в кристаллах. Сила осциллятора и время жизни излучательного перехода. Элементарные излучатели и их мультиплетность. Поляризованная люминесценция. Скрытая анизотропия примесных кристаллов и ее проявления в спектрах излучения. Миграция энергии. Однородная и неоднородная ширина спектральных линий, релаксационное уширение. Выжигание провалов. Безызлучательные переходы.		4	4	—	4
7.	Спектроскопия редкоземельных атомов в кристаллах. Различные зарядовые состояния редкоземельных (РЗ) атомов в кристаллах. $f-f$ и $f-d$ переходы. Особенности спектров двух- и трехзарядных состояний РЗ ионов. Фотохимические превращения в кристаллах с РЗ ионами. Кооперативные процессы в ансамбле РЗ ионов. Кооперативный эффект Яна-Теллера		4	4	—	4
8.	Спектроскопия во внешних полях. Симметричный аспект спектроскопии во внешних полях. Эффект Зеемана и магнитный циркулярный дихроизм. Эффект Штарка для centrosymmetric и неcentrosymmetric примесных центров. Пьезоспектроскопический эффект.		4	4	—	4

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	КСР	
9.	Центры окраски в щелочногалоидных кристаллах. Простейшие электронные центры окраски. <i>F</i> -центр, его спектры поглощения и излучения. Водородоподобная модель, электрон в ящике. <i>M</i> -, <i>R</i> - и <i>N</i> -центры. <i>F'</i> -центр. Возмущенные центры окраски в щелочногалоидных кристаллах. <i>F(A)</i> -центры первого и второго типа. Переориентация <i>F(A)</i> -центров. Дырочные центры окраски. <i>H</i> -центры. Ртутеподобные ионы в щелочногалоидных кристаллах.		4	4	–	4
	<i>Всего:</i>		36	36	–	36

4.2 Структура дисциплины

Распределение трудоемкости

Вид работы	Трудоемкость, часов		
	1 семестр	2 семестр	Всего
Общая трудоемкость	108		108
Аудиторная работа:	30		30
<i>Лекции (Л)</i>	8		8
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>	10		10
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	12		12
Самостоятельная работа:	51		51
Реферат (Р)			
Самостоятельное изучение разделов			
Самоподготовка			
Подготовка и сдача экзамена			
Вид итогового контроля			

Разделы дисциплины, изучаемые в 1 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Основы атомной спектроскопии	4	2	2		4
2	Теория симметрии	2			2	7
3	Теория кристаллического поля	4	2	2		4
4	Электронно-колебательное взаимодействие	2		2		5
5	Эффекты Яна-Теллера.	2		2		6
6	Люминесценция примесных ионов в кристаллах	6			6	4
7	Спектроскопия редкоземельных атомов в кристаллах	6	4		2	5
8	Спектроскопия во внешних полях	2		2		7
9	Центры окраски в щелочногалоидных кристаллах	2			2	7
	<i>Итого:</i>	30	8	10	12	51

4.3 Семинарские и практические занятия

№ ЛР	Наименование лабораторной Работы	Содержание семинара и лабораторной работы	Форма текущего контроля
1	Основы атомной спектроскопии	Атом водорода. Волновые функции и уровни энергии. Оператор углового момента. Операторы повышения и понижения. Квантовые числа. Водородоподобные атомы. Спин-орбитальное взаимодействие. Многоэлектронные атомы. LS-	Устный опрос

		и JJ-связь. Эквивалентные электроны. Волновые функции конфигурации эквивалентных электронов. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов. Параметры электростатического взаимодействия	
2	Теория симметрии	Операторы симметрии. Точечная группа. Порядок группы. Классы группы. Таблица умножения группы. Базис группы. Представления, их характеры. Неприводимые и приводимые представления. Точечные группы высокой, средней и низкой симметрии. Группы октаэдра и тетраэдра. Четные и нечетные представления. Прямое произведение представлений. Двойные группы и двузначные представления. Углы Эйлера.	Защита лабораторной работы № 1
3	Теория кристаллического поля	Кристаллическое поле. Слабое и сильное поле. Построение волновых функции из соображений симметрии. d-электрон в кубическом поле. Сила кристаллического поля. Поле в октаэдре, кубе, тетраэдре. Многоэлектронные атомы; их волновые функции в приближении сильного и слабого поля. Спин-орбитальное взаимодействие в кристаллическом поле. Диаграммы Танабе-Сугано. Спектры примесных атомов группы железа	Устный опрос
4	Электронно-колебательное взаимодействие	Адиабатическое приближение. Борн-Оппенгеймеровская запись волновой функции электронов и ядер. Классический, полуклассический и квантовый принцип Франка-Кондона.	Устный опрос

		Приближение Кондона. Квазилинейчатые электронно-колебательные спектры примесных атомов. Бесфононные линии. Распределение интенсивностей в электронно-колебательной полосе. Локальные, квазилокальные и кристаллические колебания. Фактор Дебая-Уоллера.	
5	Эффекты Яна-Теллера	Теорема Яна-Теллера. Взаимодействие вырожденного электронного состояния с вырожденными колебаниями. Поверхности адиабатического потенциала. Статический и динамический эффекты Яна-Теллера. Роль случайных деформаций. Ян-теллеровские расщепления полос в оптических спектрах. Фактор вибронной редукции.	Устный опрос
6	Люминесценция примесных ионов в кристаллах	Сила осциллятора и время жизни излучательного перехода. Элементарные излучатели и их мультиплетность. Поляризованная люминесценция. Скрытая анизотропия примесных кристаллов и ее проявления в спектрах излучения. Миграция энергии. Однородная и неоднородная ширина спектральных линий, релаксационное уширение. Выжигание провалов. Безызлучательные переходы.	Защита лабораторной работы № 2
7	Спектроскопия редкоземельных атомов в кристаллах	Различные зарядовые состояния редкоземельных (РЗ) атомов в кристаллах. f-f и f-d переходы. Особенности спектров двух- и трехзарядных состояний РЗ ионов. Фотохимические превращения в кристаллах с РЗ	Защита лабораторной работы № 3

		ионами. Кооперативные процессы в ансамбле РЗ ионов. Кооперативный эффект Яна-Теллера.	
8	Спектроскопия во внешних полях	Симметричный аспект спектроскопии во внешних полях. Эффект Зеемана и магнитный циркулярный дихроизм. Эффект Штарка для centrosymmetric и неcentrosymmetric примесных центров. Пьезоспектроскопический эффект.	Устный опрос
9	Центры окраски в щелочногалоидных кристаллах	Простейшие электронные центры окраски. F-центр, его спектры поглощения и излучения. Водородоподобная модель, электрон в ящике. M-, R- и N-центры. F'-центр. Возмущенные центры окраски в щелочногалоидных кристаллах. F(A)-центры первого и второго типа. Переориентация F(A)-центров. Дырочные центры окраски. H-центры. Ртутеподобные ионы в щелочногалоидных кристаллах.	Защита лабораторной работы № 4
6	Контрольная работа		

4.4 Самостоятельное изучение разделов дисциплины

Рекомендуется следующий график и календарный план самостоятельной работы аспирантов по учебным неделям (18 недель):

№ уч. недели	Темы учебной дисциплины, рекомендуемые для обязательного изучения	Темы учебной дисциплины, рекомендуемые для самостоятельного изучения
1	Атом водорода. Волновые функции и уровни энергии. Оператор углового момента. Операторы повышения и понижения. Квантовые числа. Водородоподобные атомы. Спин-орбитальное взаимодействие. Многоэлектронные атомы. LS- и JJ-связь. Эквивалентные электроны.	Диаграммы Танабе-Сугано. Спектры примесных атомов группы железа

	Волновые функции конфигурации эквивалентных электронов. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов. Параметры электростатического взаимодействия	
2	Операторы симметрии. Точечная группа. Порядок группы. Классы группы. Таблица умножения группы. Базис группы. Представления, их характеры. Неприводимые и приводимые представления. Точечные группы высокой, средней и низкой симметрии. Группы октаэдра и тетраэдра.	Распределение интенсивностей в электронно-колебательной полосе. Локальные, квазилокальные и кристаллические колебания. Фактор Дебая-Уоллера.
3	Кристаллическое поле. Слабое и сильное поле. Построение волновых функции из соображений симметрии. d-электрон в кубическом поле. Сила кристаллического поля. Поле в октаэдре, кубе, тетраэдре. Многоэлектронные атомы; их волновые функции в приближении сильного и слабого поля. Спин-орбитальное взаимодействие в кристаллическом поле.	Фактор вибронной редукции.
4	Выполнение практических заданий, тестов и контрольных работ	
5	Сила осциллятора и время жизни излучательного перехода. Элементарные излучатели и их мультиплетность. Поляризованная люминесценция. Скрытая анизотропия примесных кристаллов и ее проявления в спектрах излучения. Миграция энергии. Однородная и неоднородная ширина спектральных линий, релаксационное уширение.	Выжигание провалов. Безызлучательные переходы.
6	Различные зарядовые состояния редкоземельных (РЗ) атомов в кристаллах. f-f и f-d переходы. Особенности спектров двух- и трехзарядных состояний РЗ ионов.	Фотохимические превращения в кристаллах с РЗ ионами. Кооперативные процессы в ансамбле РЗ ионов. Кооперативный

		эффект Яна-Теллера.
7	Выполнение практических заданий, тестов и контрольных работ	
8	Симметричный аспект спектроскопии во внешних полях. Эффект Зеемана и магнитный циркулярный дихроизм. Эффект Штарка для центросимметричных и нецентросимметричных примесных центров.	Пьезоспектроскопический эффект.
9	Первичная обработка экспериментальных данных. Ошибки, возникающие при первичной обработке экспериментальных данных, и их причины. Методы усреднения экспериментальных данных.	Проблемы точности, верхняя и нижняя границы ошибок эксперимента. Косвенный характер экспериментальных данных, их обработка и интерпретация
10	Выполнение практических заданий, тестов и контрольных работ	

5. Образовательные технологии

При реализации учебной работы по освоению курса «Спектроскопия кристаллов» используются современные образовательные технологии:

- информационно-коммуникационные технологии;
- проектные методы обучения;
- исследовательские методы в обучении;
- проблемное обучение.

Успешное освоение материала курса предполагает большую самостоятельную работу аспирантов и руководство этой работой со стороны преподавателей.

В учебном процессе используются активные и интерактивные формы проведения занятий: метод проектов, метод поиска быстрых решений в группе, мозговой штурм.

Интерактивные технологии, используемые при изучении дисциплины

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
1	Л	дискуссия	4
	ПР	Устный опрос	
	ЛР	Метод поиска быстрых решений в группе, мозговой штурм	10
<i>Итого:</i>			14

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Текущий контроль:

- контрольные вопросы по разделам учебной программы.
- практические задания.

Промежуточный контроль:

- контрольные работы (4, во время самостоятельной работы, итоговая контрольная работа);

Итоговый контроль:

- экзамен.

В процессе подготовки выступлений и дискуссий формируются и оцениваются компетенции ОПК-1, ПК-1, ПК-2.

ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ, ВЫНОСИМЫХ НА ЭКЗАМЕН

1. Атом водорода. Волновые функции и уровни энергии.
2. Оператор углового момента. Операторы повышения и понижения. Квантовые числа.
3. Спин-орбитальное взаимодействие. Многоэлектронные атомы. LS- и JJ-связь. Эквивалентные электроны. Волновые функции конфигурации эквивалентных электронов.
4. Матричные элементы одно- и двухэлектронных операторов. Параметры электростатического взаимодействия.
5. Операторы симметрии. Точечная группа. Порядок группы. Классы группы. Таблица умножения группы. Базис группы.
6. Представления, их характеры. Неприводимые и приводимые представления.
7. Точечные группы высокой, средней и низкой симметрии. Группы октаэдра и тетраэдра. Четные и нечетные представления.
8. Прямое произведение представлений. Двойные группы и двузначные представления.
9. Кристаллическое поле. Слабое и сильное поле. Построение волновых функции из соображений симметрии. d-электрон в кубическом поле.
10. Сила кристаллического поля. Поле в октаэдре, кубе, тетраэдре.
11. Многоэлектронные атомы; их волновые функции в приближении сильного и слабого поля.
12. Спин-орбитальное взаимодействие в кристаллическом поле. Диаграммы Танабе-Сугано. Спектры примесных атомов группы железа.
13. Адиабатическое приближение. Борн-Оппенгеймеровская запись волновой функции электронов и ядер. Классический, полуклассический и квантовый принцип Франка-Кондона. Приближение Кондона.
14. Квазилинейчатые электронно-колебательные спектры примесных атомов. Бесфононные линии. Распределение интенсивностей в электронно-колебательной полосе.
15. Локальные, квазилокальные и кристаллические колебания. Фактор Дебая-Уоллера.
16. Теорема Яна-Теллера. Взаимодействие вырожденного электронного состояния с вырожденными колебаниями. Поверхности адиабатического потенциала.

17. Статический и динамический эффекты Яна-Теллера. Роль случайных деформаций. Ян-теллеровские расщепления полос в оптических спектрах. Фактор вибронной редукции.
18. Сила осциллятора и время жизни излучательного перехода. Элементарные излучатели и их мультиплетность.
19. Поляризованная люминесценция. Скрытая анизотропия примесных кристаллов и ее проявления в спектрах излучения. Миграция энергии.
20. Однородная и неоднородная ширина спектральных линий, релаксационное уширение. Выжигание провалов. Безызлучательные переходы.
21. Различные зарядовые состояния редкоземельных (РЗ) атомов в кристаллах. f-f и f-d переходы. Особенности спектров двух- и трехзарядных состояний РЗ ионов.
22. Фотохимические превращения в кристаллах с РЗ ионами. Кооперативные процессы в ансамбле РЗ ионов. Кооперативный эффект Яна-Теллера.
23. Симметричный аспект спектроскопии во внешних полях. Эффект Зеемана и магнитный циркулярный дихроизм.
24. Эффект Штарка для центросимметричных и нецентросимметричных примесных центров. Пьезоспектроскопический эффект.
25. Простейшие электронные центры окраски. F-центр, его спектры поглощения и излучения. Водородоподобная модель, электрон в ящике. M-, R- и N-центры. F'-центр. Возмущенные центры окраски в щелочногалоидных кристаллах.
26. F(A)-центры первого и второго типа. Переориентация F(A)-центров. Дырочные центры окраски. H-центры. Ртутеподобные ионы в щелочно-галоидных кристаллах.

На экзамене в процессе ответов на вопросы оцениваются компетенции ОПК-1, ПК-1, ПК-2.

7. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

7.1 Основная литература:

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. В 3-х частях. Издательство: [Либроком](#), 2009 г.
2. Беккер Ю. Спектроскопия. М., Издательство "Техносфера", 2009 г.
3. Барсуков В.И. Атомный спектральный анализ. М., изд-во "Машиностроение", 2005 г.
4. Лебедева В.В. Экспериментальная оптика. М., изд-во МГУ, 2005 г.

7.2. Дополнительная литература

1. Вигнер Е. Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров. М., Изд-во "Иностранная литература", 1961, 442 стр.
2. Ван-дер-Варден Б.Л. Метод теории групп в квантовой механике. Ижевск, издательский дом "Удмуртский университет", 1999, 232 стр.

3. Вонсовский С.В., Грум-Гржимайло С.В., Черепанов В.И., и др. Теория кристаллического поля и оптические спектры примесных ионов с незаполненной d-оболочкой. М., "Наука", 1969, 180 стр.
4. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Ленинград, "Наука", 1975, 440 стр.
5. Галанин М.Д. Люминесценция молекул и кристаллов. М.: "Наука", 1999 г.
6. Осадько И.С. Селективная спектроскопия одиночных молекул. М., изд-во "Физматлит", 2000 г.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая Механика. М., "Физматлит", 2001, 768 стр.
8. . Кондон Е., Шортли Г. Введение в теорию атомных спектров. М. Изд-во "Иностранная литература", 1949, 622 стр.
9. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. М., ГИФМЛ, 1963, 640 стр.
10. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М., "Физматгиз", 1963, 640 стр.
11. Вайнштейн Л.А. Атомная спектроскопия (спектры атомов и молекул). М., изд-во МИФИ, 1991, 76 стр.

7.3 Программное обеспечение

1. Программы статистической обработки данных.
2. Программы онлайн-контроля знаний аспирантов (в том числе программное обеспечение дистанционного обучения).

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

- лекционная аудитория, оснащенная мультимедийными проекторами с возможностью подключения к Wi-Fi, документ-камерой, маркерными досками для демонстрации учебного материала;
- технологическое оборудование для синтеза и роста кристаллов, а также оптические стенды;
- специализированные компьютерные классы с подключенным к ним периферийным устройством и оборудованием;
- аппаратное и программное обеспечение (и соответствующие методические материалы) для проведения самостоятельной работы по дисциплине.