

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,



/С.Н.Калмыков/

«31» мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Электронная структура и свойства лазерно-охлаждаемых 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 №2 от 14.05.2021)

Москва 2021

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 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2022/2023

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

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

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1.С. Способен использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении исследовательских и практических задач	СПК-1.С.1. При изучении систем различной природы выбирает физико-химические методы исследования, адекватные поставленной задаче	Знать: математические и физические модели, используемые при решении профессиональных задач Знать: ограничения и границы применимости физических и математических моделей Знать: приемы квантово-химического анализа электронной структуры молекул Уметь: гибко использовать возможности современных методов анализа электронной структуры молекул на всех этапах исследования
СПК-2.С. Способен проводить теоретические исследования в избранной области физической химии (молекулярная спектроскопия, строение и динамика атомно-молекулярных систем)	СПК-2.С.2 Планирует численный эксперимент в избранной области физической химии и проводит необходимые расчеты	Знать: различные методы решения практических задач в области строения и динамики атомно-молекулярных систем Уметь: грамотно планировать численный эксперимент по исследованию электронного строения и свойств лазерно-охлаждаемых молекул Уметь: анализировать и планировать выбор методов для исследования электронного строения и свойств лазерно-охлаждаемых молекул Владеть: приемами решения основных задач в области строения и динамики атомно-молекулярных систем на основе знаний фундаментальных разделов математики и физики
СПК-4.С. Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации результатов	СПК-4.С.1. Выбирает адекватные физические и математические модели для описания строения и динамики атомно-молекулярных систем	Знать: возможности и ограничения математических моделей при обработке результатов Владеть: навыками использования программных средств для обработки массива данных
СПК-5.С. Способен проводить квантовохимические, термодинамические и кинетические расчеты с использованием совре-	СПК-5.С.1. Оценивает возможности и качество программных продуктов для выполнения квантовохимических, термодинамиче-	Уметь: использовать программные продукты для обработки данных и выполнения расчетов Владеть: навыками расчета электронной структуры и свойств лазерно-охлаждаемых молекул

менных программных комплексов и баз данных	ских и кинетических расчетов	
--	------------------------------	--

3. 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 2 зачетные единицы, всего 72 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), 32 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

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

Обучающийся должен

Знать: базовые законы в области квантовой химии и основные теоретические представления о молекулярной электронной структуре

Уметь: применять основные законы квантовой химии для обсуждения результатов научного исследования

Владеть: основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими химические явления

5. 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, часы из них	Самостоятельная работа, 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. Методы охлаждения молекул: прямые и непрямые методы	20	5	5				10	10		10
Тема 2. Проблемы прямого лазерного охлаждения молекул и методы их решения: случай двухатомных молекул	18	5	5				10	8		8
Тема 3. Квазирелятивистское регулярное приближение нулевого порядка (zero-order regular approximation, ZORA)	16	4	4	2			10	6		6
Тема 4. Идентификация и расчеты электронной структуры лазерно-охлаждаемых молекул.	16	4	4				8	8		8
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40	32		32

Содержание тем:

Тема 1.

Понятие полного квантового контроля. Характерные температуры для атомов/молекул, плененных в ловушки. Прямые и непрямые методы охлаждения молекул. Нелазерные методы охлаждения. Штарковские методы охлаждения. Охлаждение буферным газом. Электрооптический метод охлаждения. Лазерные методы охлаждения.

Тема 2.

Первые предложения по лазерному охлаждению. Лазерное охлаждение атомов. Доплеровское и сизифовское лазерное охлаждение. Доплеровский предел охлаждения. Субдоплеровские методы охлаждения. Замкнутые циклы оптической циркуляции, «петля охлаждения». Представление молекулярной орбитали как линейной комбинации атомных орбиталей (МО-ЛКАО). Несвязывающие молекулярные орбитали. Понятие центра оптической циркуляции. Натуральные орбитали перехода. Молекулы CaF и RaF. Значимость релятивистских эффектов.

Тема 3.

Четырехкомпонентный гамильтониан Дирака-Кулона-Брейта. Решения с «положительной» и «отрицательной» энергией. Проблемы четырехкомпонентного подхода. Квазирелятивистские приближения. Регулярные приближения нулевого, первого и высших порядков. Проблема «изменения представления» (picture change) в ZORA. Взаимодействия, нарушающие четность (P-нечетные взаимодействия). Операторы P-нечетных молекулярных свойств в рамках ZORA. Особенности расчета P-нечетных операторов в двухатомных молекулах. P-нечетные свойства в хиральных молекулах.

Тема 4.

Принципы идентификации многоатомных лазерно-охлаждаемых молекул. Проблемы организации замкнутого цикла оптической циркуляции при переходе от двух- к многоатомным молекулам. Линейные молекулы CaOH и CaNC. Правила запрета для вибронных переходов и эффект Реннера-Теллера. Молекулы с симметрией «симметричного волчка» - CaCH₃ и MgCH₃. Хиральные лазерно-охлаждаемые молекулы. Функционализация ароматических соединений и биомолекул центрами оптической циркуляции.

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных квантово-химических программ, обработка данных на компьютерах;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса.

Преподавание курса проводится в форме лекционных и семинарских занятий с использованием мультимедийных презентаций. Часть

материала подается в форме задач и примеров. Занятия проводятся с привлечением результатов исследований, полученных непосредственно автором программы. Примеры, демонстрации и задания составлены на основе реальных экспериментальных данных, способствующих глубокому пониманию и усвоению материала курса.

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

программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, т. 3. М.: Наука, 1989.

Исаев Т.А. Прямое лазерное охлаждение молекул, УФН, т. 190 № 3, с. 313-328. М.: ФИАН. 2020.

Дополнительная литература

Зайцевский А.В. Relativistic theory of molecular electronic structure. Manual (2005), <http://qchem.pnpi.spb.ru/Andrei>.

Berger R., "Parity violation effects in molecules", In: Relativistic Electronic Structure Theory, Part: 2, Applications 4, Ed. P. Schwerdtfeger, pp 188-288.

Dyall K.G., Faegru, K. Introduction to relativistic quantum chemistry, Oxford University Press, 2004.

Kutzelnigg W, Diamagnetism in relativistic theory, Physical Review A, 67 (3), 2003.

Материально-техническое обеспечение: для проведения занятий необходима аудитория, оснащенная техникой для показа презентаций.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

Исаев Тимур Анриевич, к.ф.-м.н., внс; email: tisaev@qpd.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Текущий контроль знаний студента осуществляется в виде контрольных работ, небольших заданий и собеседований в ходе занятий.

Промежуточная аттестация по курсу проходит в виде устного зачета, на котором проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации.

Примеры домашнего задания:

Пример №1

Сформулировать понятия полного квантового контроля и определение температуры для ансамбля атомов/молекул в ловушке

Пример №2

Изучить принципы доплеровского лазерного охлаждения. Вывести формулу для доплеровского предела охлаждения.

Пример №3

Дать классификацию методов охлаждения молекул.

Пример №4

Перечислить основные типы и механизм формирования несвязывающих молекулярных орбиталей

Вопросы для зачета:

1. Атомная система единиц. Молекулярный гамильтониан в атомной системе единиц. Полный квантовый контроль. Температура плененных атомов/молекул. Примеры прямых и непрямых методов охлаждения молекул (привести типичные температуры молекулярных газов для приведенных примеров).
2. Несвязывающие молекулярные орбитали, их классификация. Квазидиагональная матрица Франка-Кондона. Понятие центра оптической циркуляции, привести примеры. Гамильтониан Дирака-Кулона, его полный спектр для свободного электрона. Примеры квазирелятивистских приближений.
3. Метод лазерного доплеровского охлаждения, доплеровский предел охлаждения. Приближение Борна-Оппенгеймера и матричный элемент перехода между колебательно-вращательными уровнями в двухатомной молекуле. Проблемы в лазерном охлаждении двухатомных молекул.

4. Центры оптической циркуляции и лазерное охлаждение многоатомных молекул. Основные проблемы при переходе от двухатомных к многоатомным молекулам. Эффекты несохранения четности в молекулах на примере хиральных молекул. Регулярное приближение нулевого порядка.

5. Производная оператора по вектору и матрице. Основные этапы метода Isotope Separation On-Line, преимущества молекул с квази-диагональной матрицей Франка-Кондона. Определение молекулярных свойств для невырожденных электронных уровней.

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 \ 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 не принципиального 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:</p> <ul style="list-style-type: none"> - математические и физические модели, используемые при решении профессиональных задач; - ограничения и границы применимости физических и математических моделей; - приемы квантово-химического анализа электронной структуры молекул; - различные методы решения практических задач в области строения и динамики атомно-молекулярных систем; - возможности и ограничения математических моделей при обработке результатов . 	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>

<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - гибко использовать возможности современных методов анализа электронной структуры молекул на всех этапах исследования; - грамотно планировать численный эксперимент по исследованию электронного строения и свойств лазерно-охлаждаемых молекул; - анализировать и планировать выбор методов для исследования электронного строения и свойств лазерно-охлаждаемых молекул; - использовать программные продукты для обработки данных и выполнения расчетов. 	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - приемами решения основных задач в области строения и динамики атомно-молекулярных систем на основе знаний фундаментальных разделов математики и физики; - навыками использования программных средств для обработки массива данных; - навыками расчета электронной структуры и свойств лазерно-охлаждаемых молекул. 	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>