

**Белорусский государственный университет**

**УТВЕРЖДАЮ**

**Проректор по учебной работе**



\_\_\_\_\_ А.Л. Толстик

\_\_\_\_\_ 2015  
Регистрационный № УД-4266/уч.

**МЕТОДЫ РАСЧЁТА ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ.  
ФОТОНИКА МОЛЕКУЛ**

**Учебная программа учреждения высшего образования  
по учебной дисциплине для специальности  
1-31 04 08 Компьютерная физика**

Минск 2017 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1- 31 04 08 -2013; учебных планов №G31-144/уч.-2013 и №G31ин.-178/уч.-2013.

**СОСТАВИТЕЛИ:**

**М.Б Шундалов** — доцент кафедры физической оптики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент;

**В.В. Могильный** – профессор кафедры физической оптики Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор.

**РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:**

Кафедрой физической оптики физического факультета Белорусского государственного университета

(протокол № 10 от 5 июня 2017 г.);

Советом физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 11 от 8 июня 2017 г.).

## ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа по учебной дисциплине «Методы расчёта оптических спектров молекул. Фотоника молекул» разработана для специальности 1-31 04 08 Компьютерная физика.

*Цели лаборатории специализации* – получить навыки компьютерного моделирования молекулярных спектров, лежащих в оптическом диапазоне; с помощью экспериментально выявляемых закономерностей создать у студентов представления о люминесценции как методе исследования молекул в электронно-возбужденных состояниях, ее основных свойствах, а также сформировать навыки экспериментальной работы при изучении люминесцентных явлений.

*Основные задачи учебной дисциплины* – дать представление о возможностях современных теоретических и вычислительных методов, позволяющих с высокой точностью воспроизводить и предсказывать оптические спектры молекулярных систем; ознакомление студентов с люминесцентными свойствами молекулярных материалов, основами экспериментальной техники исследования люминесценции, методами обработки результатов экспериментальных измерений и моделями, объясняющими механизм возникновения той или иной особенности люминесценции.

*Материал курса основан* на знаниях и представлениях, заложенных в дисциплинах «Физика атома и атомных явлений», «Квантовая механика», «Спектральные приборы», «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии, ч. 1 и ч. 2», «Молекулярная спектроскопия». Он является базовым для дисциплин: «Колебания молекул и комплексов с большой амплитудой» и «Спектроскопия нежестких молекул».

*В результате изучения дисциплины студент должен:*

*знать:*

- приближение самосогласованного поля (ССП) и метод Хартри – Фока;
- основные положения теории функционала плотности (ТФП);
- основные понятия из области люминесцентных явлений;
- основные закономерности люминесценции;
- модели, связывающие параметры люминесценции со свойствами электронно-возбужденных состояний молекул;

*уметь:*

- определять равновесную конфигурацию молекулы, рассчитывать колебательные ИК и КР спектры в рамках методов СПП Хартри – Фока и ТФП с использованием прикладных программ;
- экспериментально измерять спектры, кинетики затухания, интенсивности неполяризованной и поляризованной люминесценции;
- находить по экспериментальным данным время жизни люминесценции, ее квантовый выход и степень поляризации;

- анализировать причины изменения люминесцентных свойств при изменении состояния люминесцирующего объекта;

*владеть:*

- базовыми принципами интерпретации экспериментальных спектров многоатомных молекул на основе рассчитанных спектральных характеристик;
- экспериментальными методами измерения люминесцентных параметров и расчета на их основе характеристик люминесценции.

*Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:*

*академические компетенции:*

- уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.
- владеть системным и сравнительным анализом.
- владеть исследовательскими навыками.
- уметь работать самостоятельно.
- иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.
- иметь лингвистические навыки (устная и письменная коммуникация).

*Социально-личностные компетенции:*

- обладать качествами гражданственности.
- быть способным к социальному взаимодействию.
- обладать способностью к межличностным коммуникациям.
- владеть навыками здорового образа жизни.

*Профессиональные компетенции:*

- применять знания теоретических и экспериментальных основ физики, современных технологий и материалов, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин, методы автоматизации эксперимента;
- использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационные образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов, научное оборудование и аппаратуру;
- пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, системами автоматизированного программирования, научно-технической и патентной литературой;
- применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования, планирования, организации и ведения научно-исследовательской, научно-производственной, научно-технической и научно-педагогической работы.

-

Общее количество часов, отводимое на изучение учебной дисциплины 122 часа (3 зачетные единицы), из них лабораторные занятия 74 аудиторных часа.

Форма получения высшего обучения – очная, дневная,

Занятия проводятся на 5-м курсе в 9-м семестре.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет (9 семестр).

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

### Раздел 1 «Методы расчёта оптических спектров молекул»

**1 Определение равновесной конфигурации молекулы органического соединения.** Знакомство с работой прикладной программы MacMolPlt. Построение структурной модели молекулы органического соединения. Создание входного файла задания для поиска равновесной конфигурации исследуемой молекулы на уровне теории HF/STO-3G. Знакомство с работой прикладной программы GAMESS. Оптимизация геометрии исследуемой молекулы на уровне теории HF/STO-3G. Анализ выходного файла. Создание входного файла задания для поиска равновесной конфигурации исследуемой молекулы на уровне теории CAM-B3LYP/cc-pVDZ. Оптимизация геометрии исследуемой молекулы на уровне теории CAM-B3LYP/cc-pVDZ. Анализ выходного файла.

**2 Расчёт колебательного ИК спектра поглощения молекулы органического соединения.** Создание входного файла задания для расчёта матрицы силовых постоянных, собственных частот колебаний и интенсивностей в ИК спектре поглощения исследуемой молекулы на уровне теории CAM-B3LYP/cc-pVDZ в рамках гармонического приближения. Расчёт спектральных характеристик. Анализ выходного файла. Проверка критериев устойчивости найденной конфигурации молекулы. Построение рассчитанного спектра.

**3 Расчёт колебательного спектра КР молекулы органического соединения.** Создание входного файла задания для расчёта интенсивностей в спектре КР исследуемой молекулы на уровне теории CAM-B3LYP/cc-pVDZ в рамках гармонического приближения. Расчёт спектральных характеристик. Анализ выходного файла. Построение рассчитанного спектра.

**4 Интерпретация экспериментальных колебательных спектров на основе выполненных расчётов.** Определение форм колебаний и вкладов отдельных колебательных координат в распределение потенциальной энергии. Анализ экспериментальных колебательных ИК и КР спектров исследуемого соединения. Отнесение экспериментальных полос и линий к рассчитанным частотам и формам колебаний. Определение ошибок и погрешностей расчётов.

## Раздел 2 «Фотоника молекул»

**1. Изучение закономерностей поглощения и испускания многоатомных молекул в жидких средах.** Спектральное распределение интенсивности люминесценции. Закон зеркальной симметрии спектров поглощения и флуоресценции. Частоты симметрии и 0-0-переходов для поглощения и испускания. Универсальное соотношение спектров поглощения и испускания.

**2. Квантовый выход люминесценции и методы его измерения.** Понятие о квантовом и энергетическом выходе люминесценции. Связь квантового выхода люминесценции с вероятностями излучательных и безызлучательных переходов. Закон Вавилова. Абсолютный и относительный методы измерения квантовых выходов люминесценции. Определение квантового выхода по интегральным интенсивностям люминесценции исследуемого и эталонного люминофора.

**3. Поляризованная люминесценция растворов органических молекул.** Возбуждение поляризованной люминесценции линейно-поляризованным светом. Степень поляризации люминесценции. Предельная степень поляризации люминесценции ансамбля линейных осцилляторов. Вращательная деполяризация люминесценции и ее характерное время. Зависимость степени вращательной деполяризации от времени жизни возбужденного состояния и вязкости среды. Явление концентрационной деполяризации и ее объяснение с помощью представлений о безызлучательном переносе энергии электронного возбуждения.

**4. Изучение законов затухания люминесценции.** Экспоненциальный закон затухания люминесценции. Время жизни люминесценции. Связь времени жизни и вероятностей излучательных и безызлучательных переходов в молекулах. Получение кинетической кривой затухания люминесценции при импульсном ее возбуждении. Влияние рассеянного возбуждающего излучения. Разделение вкладов рассеяния и люминесценции в кинетическую кривую.

## УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

| Номер раздела, темы  | Название раздела, темы   | Количество аудиторных часов |                      |                     |                      |      | Количество часов УСП | Форма контроля знаний |
|--|--|-----------------------------|----------------------|---------------------|----------------------|------|----------------------|-----------------------|
|  |  | Лекции                      | Практические занятия | Семинарские занятия | Лабораторные занятия | Иное |                      |                       |
| <b>Раздел 1 «Методы расчёта оптических спектров молекул»</b> |  |                             |                      |                     |                      |      |                      |                       |
| 1.1  | Определение равновесной конфигурации молекулы органического соединения                 |                             |                      |                     | 8                    |      |                      | Устный опрос          |
| 1.2  | Расчёт колебательного ИК спектра поглощения молекулы органического соединения          |                             |                      |                     | 8                    |      |                      | Устный опрос          |
| 1.3  | Расчёт колебательного спектра КР молекулы органического соединения                     |                             |                      |                     | 8                    |      |                      | Устный опрос          |
| 1.4  | Интерпретация экспериментальных колебательных спектров на основе выполненных расчётов  |                             |                      |                     | 10                   |      |                      | Устный опрос          |
|  | Всего по разделу 1   |                             |                      |                     | 34                   |      |                      |                       |
| <b>Раздел 2 «Фотоника молекул»</b>                           |  |                             |                      |                     |                      |      |                      |                       |
| 2.1  | Изучение закономерностей поглощения и испускания многоатомных молекул в жидких средах. |                             |                      |                     | 12                   |      |                      | Устный опрос          |
| 2.2  | Квантовый выход люминесценции и методы его измерения                                   |                             |                      |                     | 8                    |      |                      | Устный опрос          |
| 2.3  | Поляризованная люминесценция растворов органических молекул                            |                             |                      |                     | 12                   |      |                      | Устный опрос          |
| 2.4  | Изучение законов затухания люминесценции   |                             |                      |                     | 8                    |      |                      | Устный опрос          |
|  | Всего по разделу 2   |                             |                      |                     | 40                   |      |                      |                       |
|  | Всего часов  |                             |                      |                     | 74                   |      |                      | Зачет                 |

## ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

### Раздел 1 «Методы расчёта оптических спектров молекул»

#### Перечень основной литературы

1. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Минаев. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону, Феникс, 1997.
2. F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry. John Wiley & Sons, 2007.
3. С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. Москва, Мир, 1983.
4. О. Фларри. Квантовая химия. Москва, Мир, 1985.
5. Теория неоднородного электронного газа. Москва, Мир, 1987.
6. Ф. Банкер, П. Йенсен. Симметрия молекул и спектроскопия, Москва, Мир, 2004
7. R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle. Spectrometric Identification of Organic Compounds. Wiley & Sons, 2005.

#### Перечень дополнительной литературы

1. П. Эткинс. Кванты: справочник концепций. Москва, Мир, 1977.
2. Дж.А. Попл. Квантово-химические модели. Успехи физических наук, т. 172, с. 349 – 356, 2002.
3. В. Кон. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности. Успехи физических наук, т. 172, с. 336 – 348, 2002.
4. Г.А. Пицевич, М.Б. Шундалов. Молекулярная спектроскопия. Минск, БГУ, 2005.

#### Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Устные опросы.

#### *Примерный перечень вопросов для проведения устных опросов*

1. Дать определение равновесной конфигурации молекулы.
2. Какие критерии используются для определения устойчивости рассчитанной конфигурации молекулы?
3. Каковы основные принципы формирования колебательных ИК и КР спектров?
4. Каковы основные методы учёта электронной корреляции?
5. Какова структура обменно-корреляционного функционала CAM-B3LYP?

6. Основные критерии выбора базисного набора для выполнения квантово-химического расчёта.

## Раздел 2. «Фотоника молекул»

### Перечень основной литературы

1. И.М.Гулис, А.И.Комяк. Люминесценция. Мн.:БГУ, 2009.
2. Л.В.Левшин, А.М.Салецкий. Люминесценция и ее измерения. М.:Изд-во МГУ, 1989.

### Перечень дополнительной литературы

1. В.В.Могильный. Полимерные фоторегистрирующие материалы и их применение: курс лекций. Мн.:БГУ, 2003.
- 2.

### Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Устные опросы.

#### *Примерный перечень вопросов для проведения устных опросов*

1. Определение люминесценции С.И.Вавилова.
2. Правило зеркальной симметрии Левшина.
3. Универсальное соотношение Б.И.Степанова.
4. Время жизни люминесценции.
5. Определение энергетического и квантового выхода люминесценции.
6. Абсолютный и относительный методы измерения квантового выхода.
7. Степень поляризации люминесценции.
8. Фотоселекция как причина возникновения поляризованной люминесценции.
9. Вращательная деполяризация люминесценции.
10. Концентрационная деполяризация и миграция энергии электронного возбуждения.

## **Методика формирования итоговой оценки**

Итоговая оценка выставляется с учетом:

1. Правил проведения аттестации, утвержденных постановлением Министерства образования Республики Беларусь № 53 от 29 мая 2012 г.
2. Положения о рейтинговой системе БГУ (редакция 2015 г.).
3. Критериев оценки студентов (10 баллов).

## ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

| Название дисциплины, с которой требуется согласование      | Название кафедры          | Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине | Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)            |
|--|---------------------------|--|--|
| Спектральные приборы                                       | Кафедра физической оптики | Оставить содержание учебной дисциплины без изменения                                     | Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте<br>протокол № 10<br>от 5 июня 2017г. |
| Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. Ч.1. | Кафедра физической оптики | Оставить содержание учебной дисциплины без изменения                                     | Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте<br>протокол № 10<br>от 5 июня 2017г. |
| Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. Ч.2. | Кафедра физической оптики | Оставить содержание учебной дисциплины без изменения                                     | Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте<br>протокол № 10<br>от 5 июня 2017г. |
| Колебания молекул и комплексов с большой амплитудой        | Кафедра физической оптики | Оставить содержание учебной дисциплины без изменения                                     | Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте<br>протокол № 10<br>от 5 июня 2017г. |
| Молекулярная спектроскопия                                 | Кафедра физической оптики | Оставить содержание учебной дисциплины без изменения                                     | Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте<br>протокол № 10<br>от 5 июня 2017г. |

## ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО

на \_\_\_\_ / \_\_\_\_ учебный год

| №<br>№<br>ПП | Дополнения и изменения | Основание |
|--------------|------------------------|-----------|
|              |                        |           |

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры  
(протокол № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.)

Заведующий кафедрой

физической оптики  
д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ А.А. Минько

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета  
д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ В.М. Анищик