

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе



_____ А.Л. Толстик

_____ 2015

Регистрационный № УД-1517/уч.

**ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ГРУПП
В МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ Ч.1.
СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ**

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

Минск 2015 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1- 31 04 08 -2013;
учебных планов №G31-144/уч. и №G31и-178/уч.

СОСТАВИТЕЛИ:

Раздел I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч. I»

Г.А. Пицевич — доцент кафедры физической оптики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент;

Раздел II «Спектральные приборы»

М.М. Сидоренко – старший преподаватель кафедры физической оптики Белорусского государственного университета.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической оптики физического факультета Белорусского государственного университета
(протокол № 11 от 17 июня 2015г.);

Советом физического факультета Белорусского государственного университета
(протокол № 10 от 18 июня 2015г.).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа учебной дисциплины «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1. Спектральные приборы» относится к циклу дисциплин специализации. Учебная дисциплина включает два раздела:

Раздел I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч.1»

Раздел II «Спектральные приборы».

Цель учебной дисциплины — анализ колебательных спектров веществ в зависимости от возможностей спектральной аппаратуры и симметрии исследуемых молекул.

Задачи учебной дисциплины — дать представление о возможностях теории групп в классификации молекулярных спектров, определении правил отбора и анализа колебательных спектров, направлениях разработки спектральной аппаратуры и оптимизации ее режимов работы.

Теория групп, возникнув первоначально как чисто математическая дисциплина, сравнительно недавно стала с успехом применяться в различных областях физики. Красота и мощь этого метода стала наиболее очевидна, когда с помощью ее было показано что универсальные законы сохранения энергии, импульса и момента импульса непосредственно связаны с симметрией пространства. Одним из фундаментальных применений теории групп остается классификация различных состояний атомов, молекул и кристаллов, а также установление правил отбора при переходах между различными уровнями и интерпретации спектров, полученных на различных спектральных приборах.

Несмотря на общность подходов, применение теории групп в различных областях физики имеет свою специфику, что обуславливает необходимость данного курса. Знакомство с основными понятиями теории групп в данном курсе сопровождается рассмотрением многочисленных примеров, связанных с симметрией молекул. В первой части курса основное внимание уделяется использованию теории групп при анализе колебательных спектров многоатомных молекул. При этом студенты самостоятельно решают ряд задач по составлению приводимого представления и разложению его на неприводимые для модельных молекул с целью закрепления материала.

Протяженность оптического диапазона электромагнитных волн является одной из причин широкого использования спектральных приборов для изучения как химического строения молекул вещества, так и процессов, происходящих внутри вещества. Студенты получившие из курсов атомной физики и оптики базовые знания о природе явлений, обуславливающих характеристичность спектров и об основных принципах работы классических приборов с пространственной дисперсией, знакомятся с основными задачами оптической спектрометрии, формированием наблюдаемого контура спектральной линии и восстановлением его истинного вида. Рассматриваются информационные возможности спектрометрических систем и способы повышения скорости накопления информации.

Акцентируется внимание на исследовании строения органических и неорганических молекул, а также их свойств. Студенты знакомятся с характеристиками диспергирующих элементов и типовыми конструкциями приборов на их основе. Рассматриваются вопросы интерпретации колебательных спектров с учетом особенностей симметрии молекул и их физических свойств.

Материал курса основан на знаниях и представлениях, заложенных в дисциплине «Оптика». Он является базовым для дисциплин: «Спектроскопия двухатомных молекул», «Спектроскопия многоатомных молекул», «Жидкокристаллические структуры».

В результате интегрированного изучения дисциплины студент должен:

знать:

- основные законы и положения теории групп;
- особенности симметрии молекул и их физических свойств;
- принципы построения как классических, так и современных спектральных приборов;
- методы оптимизации режимов работы спектральной аппаратуры;
- возможности и перспективы использования спектрального анализа при изучении строения молекул в зависимости от их симметрии.

уметь:

- раскладывать приводимые представления на неприводимые, использовать оператор проектирования для построения координат симметрии;
- использовать методики спектрального анализа в практической деятельности при расшифровке колебательных спектров с учетом симметрии молекул.

владеть:

- базовыми принципами группового анализа колебательных спектров многоатомных молекул;
- знаниями по выбору спектральной аппаратуры при изучении строения и свойств веществ.

Общее количество часов, отводимое на изучение *раздела I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч. I»* — 20, из них количество аудиторных часов — 16. Аудиторные занятия проводятся в виде лекций и семинарских занятий. На проведение лекционных занятий отводится 12 часов, на семинарские занятия — 4 часа.

Общее количество часов, отводимое на изучение *раздела II «Спектральные приборы»* — 62, из них количество аудиторных часов — 38. Аудиторные занятия проводятся в виде лекций и семинарских занятий. На проведение лекционных занятий отводится 34 часов, на семинарские занятия — 4 часов.

Общее количество часов по дисциплине *«Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч. I. Спектральные приборы»* — 82 часа, в том

числе аудиторных — 54 часа, из них — 46 часов лекций, 8 часов практических занятий.

Форма получения высшего образования — очная, дневная,

Занятия проводятся на 3-м курсе в 5-м семестре.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет (5 семестр).

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч. I»

1.1 Основные понятия и законы теории групп и представлений. Определение группы. Групповые законы. Примеры групп. Таблица умножения группы. Подгруппа. Класс. Изоморфные и гомоморфные группы. Представление группы.

1.2. Применение теории групп к колебательной спектроскопии. Колебательные координаты молекул (декартовы, естественные и эквивалентные) как линейное пространство для точечных групп симметрии. Приводимые и неприводимые представления группы. Характеры представления. Таблица характеров неприводимых представлений. Формула приведения представления. Формулы для вычисления характеров приводимого представления в задаче о колебании молекулы. Оператор проектирования. Построение координат симметрии. Определение симметрии составных частот и обертонов. Взаимосвязь между типами симметрий колебаний молекул, принадлежащих к различным точечным группам симметрии. Правила отбора в колебательных спектрах.

1.3. Групповой анализ колебательных спектров некоторых молекул. Теоретико-групповой анализ колебаний молекул H_2O , CH_2Br_2 , CHCl_3 . Теоретико-групповой анализ колебаний молекул CH_4 , C_2H_4 , C_6H_6 .

Раздел II «Спектральные приборы»

2.1. Принципиальная схема спектрального прибора. Световая волна как носитель информации. Спектральные приборы и их классификация. Возможные алгоритмы обработки спектральной информации. Основные задачи теории спектральных приборов.

2.2. Формирование контуров. Аппаратная функция и её формирование. Формирование контура спектральной линии.

2.3. Оптимизация режима работы спектрального прибора. Скорость получения информации, Выбор оптимальной спектральной полуширины щели.

2.4. Системы ввода излучения. Трансформация светового потока при его прохождении через оптическую систему. Способы освещения входных щелей. Освещение щели поверхностным и объемным источниками. Однолинзовый конденсор. Виньетирование коллиматорным и камерным объективами. Трехлинзовая система. Растровые осветители. Осветительные системы спектрофотометров. Когерентное и не-когерентное освещение щели.

2.5. Факторы, определяющие разрешение. Угловая дисперсия. Линейная дисперсия. Разрешающая сила. Причины, вызывающие ухудшение качества изображения. Теоретический и реальный пределы разрешения. Критерии разрешения. Связь между дисперсией, разрешающей силой и относительным

отверстием объектива.

2.6. Призма как диспергирующий элемент. Преломление в плоскости главного сечения. Угол наименьшего отклонения. Дисперсия призмы. Дисперсия системы призм. Разрешающая способность призмённого прибора. Влияние поглощения на разрешающую силу призмы. Дефекты изготовления призм. Потери света на отражение и поляризующее действие призмы. Астигматизм. Кривизна спектральных линий в призмённых приборах. Схемы призмённых приборов.

2.7. Дифракционные решетки. Прозрачная дифракционная решетка. Отражательная решетка. Формирование инструментального контура. Разрешающая способность. Дисперсия. Переложение порядков. Эффективность. Голографические решетки. Кривизна спектральных линий. Вогнутые решетки. Астигматизм вогнутых решеток. Схемы установок решеток. Диспергирующие системы со скрещенной дисперсией.

2.8. Интерференционные спектрометры. Интерферометр Фабри-Перо. Образование интерференционной картины. Угловая и линейная дисперсии. Область дисперсии. Аппаратная функция. Разрешающая способность. Реальный прибор. Мультиплекс. Применение интерферометров в спектральных приборах. Светосила. Спектрометр Фабри-Перо.

2.9. Спектрометры с растрами. Принципы работы растровых монохроматоров. Аппаратная функция растрового прибора. Аподизация аппаратной функции контуром растра и дефокусировкой. Схемы построения растровых спектрометров. Двумерные растры. Фазовое кодирование на выходе. Псевдослучайные растры. Выигрыш Фелжета в отношении сигнал/шум.

2.10. Особенности классических приборов. Достоинства и недостатки призмённых, дифракционных и интерференционных классических приборов.

2.11. Адамар-спектрометры. Спектрометры с преобразованием Адамара. Применение дискретных кодов. Отношение сигнал/шум в спектре. Конструкция Адамар-спектрометра. Двойное пространственное кодирование.

2.12. Фурье-спектрометры. Фурье-спектрометры. Основные принципы работы. Аппаратная функция. Светосила.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
Раздел I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч.1»								
1.1	Основные понятия и законы теории групп и представлений	2						Устные опросы
1.2.1	Колебательные координаты молекул (декартовы, естественные и эквивалентные) как линейное пространство для точечных групп симметрии. Приводимые и неприводимые представления группы.	2		2				Устные опросы
1.2.2	Характеры представления. Таблица характеров неприводимых представлений. Формула приведения представления. Формулы для вычисления характеров приводимого представления в задаче о колебании молекулы.	2						Устные опросы

1.2.3	Оператор проектирования. Построение координат симметрии. Определение симметрии составных частот и обертонов.	2						Решение задач
1.2.4	Взаимосвязь между типами симметрий колебаний молекул, принадлежащих к различным точечным группам симметрии. Правила отбора в колебательных спектрах.	2						Устные опросы
1.3.1	Групповой анализ колебательных спектров некоторых	2		2				Решение задач
	Итого по разделу	12		4				
<i>Раздел II «Спектральные приборы»</i>								
2.1.1	Принципиальная схема спектрального прибора	2						Устный опрос
2.1.2	Основные задачи теории спектральных приборов	2						Устный опрос
2.2	Формирование контуров. Аппаратная функция и ее формирование.	2						Устный опрос
2.3	Оптимизация режима работы спектрального прибора	2						Устный опрос
2.4.1	Системы ввода излучения	2						Устный опрос
2.4.2	3-линзовая система освещения. Растровые осветители.	2						Устный опрос
2.5	Факторы, определяющие разрешение	2						Устный опрос

2.6.1	Призма как диспергирующий элемент	2						Устный опрос
2.6.2	Дефекты призм. Схемы призмённых приборов.	2						Устный опрос
2.7.1	Дифракционные решетки	2						Устный опрос
2.7.2	Кривизна спектральных линий. Схемы установок решеток.	2						Устный опрос
2.8.1	Интерференционные спектрометры	2						Устный опрос
2.8.2	Интерферометр Фабри-Перо.			2				Доклады на семинарских занятиях
2.8.3	Спектрометр Фабри-Перо.	2						Устный опрос
2.9.1	Спектрометры с растрами	2						Устный опрос
2.9.2	Двумерные растры	2						Устный опрос
2.10	Особенности классических приборов			2				Доклады на семинарских занятиях
2.11	Адамар-спектрометры	2						Устный опрос
2.12	Фурье-спектрометры	2						Устный опрос
	Итого по разделу	34		4				
	Всего часов	46		8				

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Раздел I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии. ч. I»

Перечень основной литературы

1. Мурнаган Ф. Теория представлений групп. 1950
2. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. 1966
3. Петрашень М.И., Трифонов Е.Д. Применение теории групп в физике. 1967

Перечень дополнительной литературы

1. А.Г.Курош Теория групп 1970
2. Хаггиарти М. Симметричные представления в химии. Мир, 1988

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Устные опросы;
2. Решение задач.

Раздел II «Спектральные приборы»

Перечень основной литературы

1. Лебедева В.В, Экспериментальная оптика. М., МГУ, 1994
2. Лебедева В.В. Техника оптической спектроскопии М.,МГУ, 1977
3. Светосильные спектральные приборы. Под ред. Тарасова К.И., М., Наука, 1988
4. Малышев В.И. Введение в экспериментальную спектроскопию. М., Наука, 1979
5. Зайдель А.Н.,Островская Г.В.,Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. . М, Наука, 1976
6. Толмачев Ю.А. Новые спектральные приборы Л.,ЛГУ, 1976

Перечень дополнительной литературы

1. Прикладная физическая оптика. Под ред. Москалева В.А. С-П, Политехника, 1995
2. Новые методы спектроскопии. Под ред. Раутиана С.Г. Новосибирск, Наука, 1988
3. Современные тенденции в технике спектроскопии. Под ред. Раутиана С.Г. Новосибирск, Наука, 1988
4. Пейсахсон И.В. Оптика спектральных приборов М., Машиностроение, 1975.

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Устные опросы;
2. Доклады на семинарских занятиях.

Рекомендации по контролю качества усвоения знаний и проведению аттестации

Для текущего контроля качества усвоения знаний рекомендуется использовать семинарские занятия по разделам дисциплины и устные опросы. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно. Оценка каждого из устных ответов и семинаров проводится по десятибалльной шкале.

Оценка текущей успеваемости по разделу I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1» рассчитывается по формуле:

$$\text{текущая1} = 0,6 \cdot \frac{\sum_{i=1}^n \text{реш.задач}_i}{n} + 0,2 \cdot \frac{\sum_{i=1}^n \text{устн}_i}{n} + \text{ПБ} - \text{ШБ},$$

где *текущая1* – это оценка текущей успеваемости по разделу «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1», *реш. задач* – оценки по десятибалльной шкале, полученные за решение задач, *устн_i* – оценка по десятибалльной шкале за устный ответ, *n* – количество ответов (или решенных задач); *ПБ* – поощрительные баллы, начисляемые за выполнение дополнительных (необязательных) заданий, активность на занятиях (максимум 2 балла за семестр), *ШБ* – штрафные баллы, которые начисляются за пропуски занятий, систематическое опоздание, нарушение учебной дисциплины.

Оценка текущей успеваемости по разделу II «Спектральные приборы» рассчитывается по формуле:

$$\text{текущая2} = 0,6 \cdot \left(\frac{\text{семинар1} + \text{семинар2}}{n} \right) + 0,2 \cdot \frac{\sum_{i=1}^n \text{устн}_i}{n} + \text{ПБ} - \text{ШБ},$$

где *текущая2* – это оценка текущей успеваемости по разделу «Спектральные приборы», *семинар1* и *семинар2* – оценки по десятибалльной шкале, полученные за ответы на семинарских занятиях 1 и 2 соответственно, *устн_i* – оценка по десятибалльной шкале за устный ответ, *n* – количество ответов; *ПБ* – поощрительные баллы, начисляемые за выполнение дополнительных (необязательных) заданий, активность на занятиях (максимум 2 балла за семестр), *ШБ* – штрафные баллы, которые начисляются за пропуски занятий, систематическое опоздание, нарушение учебной дисциплины.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме зачета. К зачету допускаются студенты, чья оценка текущей успеваемости по каждому из разделов не менее 4 баллов. Если студент имеет неудовлетворительную оценку по любому из разделов дисциплины, то ему выставляется неудовлетворительная оценка по всей дисциплине.

Зачет проводится совместно по разделам «Спектральные приборы» и «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1». Весовые коэффициенты: для раздела «Спектральные приборы» - 0,5; для раздела «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1» - 0,5.

Итоговая оценка рассчитывается по формуле:

$$итог = 0,4 \cdot \left(\frac{текущая1 + текущая2}{2} \right) + 0,6 \cdot зачет,$$

где *итог* – итоговая оценка, *текущая1* - текущая оценка по разделу I «Применение теории групп в молекулярной спектроскопии ч.1», *текущая2* – текущая оценка по разделу II «Спектральные приборы», *зачет* – оценка, полученная на зачете (выставляется совместно двумя преподавателями по согласованию), 0,4 и 0,6 – весовые коэффициенты текущей успеваемости и оценки, полученной на зачете соответственно. Округление оценки производится по общему правилу. Студент считается успешно сдавшим зачет, если итоговая оценка не ниже 4 баллов.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной 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)
Оптика	Кафедра общей физики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № 11 от 17 июня 2015г.
Спектроскопия двухатомных молекул	Кафедра физической оптики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № 11 от 17 июня 2015г.
Спектроскопия многоатомных молекул	Кафедра физической оптики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № 11 от 17 июня 2015г.
Жидкокристаллические структуры	Кафедра физической оптики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте протокол № 11 от 17 июня 2015г.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО

на ____/____ учебный год

№ № 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