

Белорусский государственный университет

**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по учебной работе  
и образовательным инновациям

О.И. Чуприс

(подпись)

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 6179 /уч.

**СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОСТРУКТУР. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА  
МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ**

**Учебная программа учреждения высшего образования  
по учебной дисциплине для специальностей  
1- 31 04 01 Физика (по направлениям)  
направление 1-31 04 01-01 Физика  
(научно-исследовательская деятельность)**

Минск 2018 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 04 01-2013, учебных планов № G31-214/уч., G31и-215/у. от 20.02.2018 г.

**СОСТАВИТЕЛЬ:**

**А.А. Луговский** — доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

**РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:**

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.);

Советом физического факультета (протокол № 12 от 28 июня 2018 г.).

## ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа дисциплины «Спектроскопия наноструктур. Квантовая механика молекулярных систем» разработана для специальности 1-31 04 01 - Физика (по направлениям) направления специальности 1-31 04 01-01 Физика (научно-исследовательская деятельность).

Квантово-механическое описание различных систем всегда позволяло более точно выбирать подходы к оптимальному выбору необходимой структуры или подбору эффективных методов синтеза этих систем. Активное развитие возможностей и параметров вычислительной техники в последние годы позволила расширить возможности и точность при вычислениях квантово-механическими методами. С появлением квантово-механических методов расчета молекулярных систем важные качественные изменения произошли в оптике: возобновился интерес к классическим ее разделам, появилась возможность расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем, расчетов ИК спектров и термодинамических характеристик молекул, расчетов электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний.

**Цель** дисциплины — дать студентам теоретические основы квантово-механических методов расчета молекулярных систем, ознакомить их с широко доступными программными продуктами Chem.3D и HyperChem, MORAC, GAMESS позволяющими проводить оптимизацию геометрии молекул методами *ab initio*, молекулярной механики и полуэмпирическими квантово-химическими методами, дать студентам, обучающимся по специальностям связанным с нанотехнологиями, теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии, а также применимость данных методов к наноразмерным объектам с целью определения их фотофизических свойств.

Предлагаемая программа решает задачи ознакомления студентов с важнейшими теоретическими вопросами квантовой механики, а также с конкретными методами расчета молекулярных систем и их практического применения. Приобретенные знания важны для более глубокого и качественного понимания других дисциплин. На примерах молекулярных систем студенты могут увидеть конкретное приложение квантово-механических представлений.

Нанотехнологии в настоящий момент являются одними из приоритетных направлений развития научных исследований в нашей республике и во всем мире. Наноструктурированные системы: атомные кластеры (квантовые точки), волокна, трубки, пленки, гранулы, поры и другие наноразмерные объекты уже нашли всевозможное применение в технологических процессах, основанных на 5 и 6 технологических укладах. Дальнейший прогресс в создании и исследовании низкоразмерных систем, обладающих комплексом уникальных свойств, безусловно приведет к новым перспективным, прорывным разработкам в нанопотонике, нанобиологии,

наноэлектронике и других технологических отраслях. Спектроскопические исследования наноразмерных объектов являются одними из основных и необходимых методов исследования данных систем.

Предлагаемая программа решает задачи ознакомления студентов с важнейшими теоретическими вопросами молекулярной спектроскопии, не только применительно к простейшим молекулярным системам, но и более сложных, пространственно-структурированным наноразмерным объектам. Приобретенные знания важны для более глубокого и качественного понимания других дисциплин. На примерах фотофизических свойств наноструктурированных систем студенты могут увидеть конкретное приложение методов молекулярной спектроскопии.

В результате изучения дисциплины студент должен

**знать:**

- основы квантово-механических методов расчета молекулярных систем, ознакомить их с широко доступными программными продуктами Chem.3D и HyperChem, MOPAC, GAMESS;

- теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии, а также применимость данных методов к наноразмерным объектам с целью определения их фотофизических свойств.

**уметь:**

- проводить оптимизацию геометрии молекул методами *ab initio*, молекулярной механики и полуэмпирическими квантово-химическими методами.

**владеть:**

- конкретными методами расчета молекулярных систем и их практического применения.

- современными тенденциями в спектроскопическом анализе новейших созданных наноразмерных объектов

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.

- Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).

- Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.

- Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.

- Обладать навыками устной и письменной коммуникации.

- Уметь учиться, повышать свою квалификацию в течение всей жизни.

**Социально-личностные компетенции:**

- Быть способным к социальному взаимодействию.
- Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
- Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
- Уметь работать в команде.

**Профессиональные компетенции:**

- Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики и математики, 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.
- Проводить планирование и реализацию физического эксперимента используя квантово-механические методы.
- Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, научно-технической и патентной литературой.
- Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования.
- Применять знания физических основ современных технологий, методы внедрения инноваций в научно-производственной, научно-педагогической и научно-технической деятельности.

Программа дисциплины основывается на знаниях и представлениях, полученных при изучении дисциплин «Электричество и магнетизм» и «Оптика», «Физика лазеров». Сведения, приобретенные в ходе изучения дисциплины, важны для более глубокого и качественного усвоения дисциплин «Нанопотоника. Волоконная оптика» и «Когерентная оптика и голография».

Программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта. Общее количество часов – 64; аудиторное количество часов – 32, из них: лекции – 28, аудиторный контроль УСП – 4.

Форма получения высшего образования — очная, дневная. Занятия проводятся на 4-ом курсе в 7-ом семестре.

Формы текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет (1,5 зачетная единица).

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

- 1. Введение. Основные свойства и классификация наноструктур.** Предмет и программа курса. Наноструктуры: типы, основные свойства. Краткий обзор основных принципов и этапов развития спектроскопии наноструктур.
- 2. Мёссбауэровская спектроскопия. Рентгеновская спектроскопия наноструктур.** Основные принципы мёссбауэровской спектроскопии наноструктур. Сверхтонкое взаимодействие, квадрупольное расщепление, магнитное расщепление мёссбауэровского спектра. Мёссбауэровская спектроскопия магнитных наночастиц. Рентгеновская спектроскопия наноразмерных объектов: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеноструктурный анализ.
- 3. Дифракционные методы исследования наноструктур.** Дифракция рентгеновского излучения и нейтронов. Малоугловая рентгеновская дифрактометрия. Характеризация функциональных свойств наносистем дифракционными методами.
- 4. Методы оптической спектроскопии наноструктур. Спектроскопия одиночных молекул. ИК- и КР-спектроскопия.** Спектроскопия электронного поглощения и флуоресценции наноструктур. Лазерная сканирующая конфокальная микроскопия. Спектроскопия одиночных молекул. ИК- и КР-спектроскопия наноструктур.
- 5. Микроскопические методы исследования наноструктур.** Просвечивающая электронная микроскопия. Растровая электронная микроскопия. Сканирующая зондовая микроскопия наноструктур.
- 6. Спектроскопия биомолекул.** Биополимеры. Методы исследования динамики биомолекул: метод оптического стробирования ("накачка-зондирование"). ЯМР-спектроскопия биомолекул, методы COSY, NOESY, ГКР — основные характеристики и механизмы, экспериментальные методики получения спектров, объекты исследования.
- 7. Оптические свойства полупроводниковых наносистем. Квантовые точки. Классификация, свойства, методы исследования.** Спектроскопия квантовых точек и других квантовых объектов в материаловедении и нанотехнологиях. Фотолюминесцентная спектроскопия нанокompозитов.
- 8. Спектроскопия полициклических структур углерода.** Фотофизические методы исследования фуллеренов, нанотрубок, графена. Матрицы возбуждения - испускания – пропускания.
- 9. Методы получения наночастиц и наноматериалов.** Классификация методов синтеза наноматериалов. Физические методы: газофазный синтез, механосинтез, детонационные методы. Химические методы: золь-гель метод, нанотермальный метод, нанореакторы. Нанолитография.
- 10. Фотонные кристаллы.** Структура, размерность фотонных кристаллов. Фотонные запрещенные зоны. Основы теории фотонных кристаллов. Методы формирования и исследования.
- 11. Применение наноматериалов.** Наномеханика и наноустройства. Применение в наноэлектронике, нанокomпьютеры. Молекулярная электроника. Нанобиотехнология.
- 12. Введение в квантовую механику молекулярных систем.** Краткий обзор основных принципов и этапов развития квантовой механики.

13. **Основные понятия и приближения квантовой химии.** Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Понятие самосогласованного поля

14. **Неэмпирические методы.** Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Теория возмущений. Виды базисных функций Методы расчета молекулярных одно- и двухэлектронных многоцентровых интегралов.

15. **Методы учета электронной корреляции.** Многодетерминантные волновые функции. Методы ограниченного и полного КВ. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений.

16. **Полуэмпирические методы.** Метод МО ЛКАО и метод Хюккеля. Полуэмпирические методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием: CNDO, INDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, ZINDO/S.

17. **Теория функционала плотности.** Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП).

18. **Краткое знакомство с методом молекулярной механики.**

19. **Изучение программных пакетов** HyperChem, MORAC, GAMESS. Ввод данных. Оптимизация геометрии, расчет энергетических и спектральных характеристик.

## УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	Введение. Основные свойства и классификация наноструктур.	2						Устный опрос
2	Мёссбауэровская спектроскопия. Рентгеновская спектроскопия наноструктур.	2						Устный опрос
3	Дифракционные методы исследования наноструктур.	2						Устный опрос
4	Методы оптической спектроскопии наноструктур. Спектроскопия одиночных молекул. ИК- и КР-спектроскопия.	2						Устный опрос
5	Микроскопические методы исследования наноструктур.	2						Устный опрос
6	Спектроскопия биомолекул. Методы ЯМР-спектроскопии наноструктур. Гигантское комбинационное рассеивание.	2						Устный опрос
7	Оптические свойства полупроводниковых наносистем. Квантовые точки. Классификация, свойства, методы исследования.	2						Устный опрос
8	Спектроскопия полициклических структур углерода.	2						Устный опрос
9	Методы получения	2						Устный

	наночастиц и наноматериалов.							опрос
10	Фотонные кристаллы. Применение наноматериалов.	2					2	Устный опрос Проверка рефератов
11	Введение в квантовую механику молекулярных систем Основные понятия и приближения квантовой химии.	2						Устный опрос
12	Неэмпирические методы.	2						Устный опрос
13	Методы учета электронной корреляции	2						Устный опрос
14	Полуэмпирические методы.	2						Устный опрос
15	Теория функционала плотности.	2						Устный опрос
16	Краткое знакомство с методом молекулярной механики. Изучение программных пакетов	2					2	Устный опрос Проверка рефератов
	<b>Всего</b>	<b>28</b>					<b>4</b>	<b>Зачет</b>

## **ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

### **Перечень основной литературы**

1. Елисеев А.А., Лукашин А.В. Функциональные наноматериалы / Под Ред. Ю.Д. Третьякова. – М.: Физматлит, 2010. – 456 с.
2. Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии: Учебное пособие / Азаренков Н. А., Береснев В. М., Погребняк А. Д., Маликов Л. В., Турбин П. В. – Х.: ХНУ имени В. Н. Каразина, 2009. – 209 с.
3. Андриевский Р.А. Рагуля А.В. Наноструктурные материалы: Учеб. Пособие для студ. Высш.учеб. заведение – М.: Изд. Центр «Академия», 2005. – 192 с.
4. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены: Учебн. пособие. – М.: Университетская книга, Логос, 2006. – 376 с.
5. К Бенуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. М., Мир, 1985

### **Перечень дополнительной литературы**

1. Г.Н.Макаров. Применение лазеров в нанотехнологии: получение наночастиц и наноструктур методами лазерной абляции и лазерной нанолитографии // Успехи физических наук. 2013, Т.183, №7. С.673-714.
2. Ю.Г. Вайнер. Спектроскопия одиночных молекул и динамика неупорядоченных твердых тел// Успехи физических наук. 2004, Т.174, №6. С.659-683
3. И.П. Суздаев. Физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва. КомКнига, 2006..
4. Васильев Р.Б., Дирин Д.Н. Квантовые точки: синтез, свойства, применение. – М.: ФНМ, 2007. – 34 с.

### **Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности**

1. Реферативные работы.
2. Устные опросы.

### **Мероприятия для контроля управляемой самостоятельной работой**

Для контроля УСР используются проверки рефератов и устные опросы.

### **Перечень тем для проведения устных опросов**

1. Наноструктуры. Основные термины и определения.
2. Особенности термодинамики наноструктур
3. Электрофизические свойства наноструктур
4. Оптические свойства низкоразмерных структур.

5. Нанокompозиты и наноматериалы, перспективы их использования.
6. Применение низкоразмерных систем в наноэлектронике.

### **Перечень тем рефератов**

1. Примеры влияния квантоворазмерных эффектов на фотофизические свойства материалов.
2. Теоретическая модель кластера.
3. Градиентные композиционные материалы.
4. Квантовые точки. Методы исследования и применение квантовых точек.
5. Двумерная ЯМР-спектроскопия биомолекул.
6. Спектроскопия одиночных молекул.
7. Гигантское комбинационное рассеивание — основные методики исследования материалов.
8. Биологические композиционные материалы и биосовместимые композиты.
9. Золь-гель синтез наноматериалов.
10. Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза.
11. Одномерные полициклические системы на основе углерода.
12. Синтез и исследование тубулярных наноструктур.
13. Системы «гость-хозяин» на основе углеродных нанотрубок.
14. Фуллерены. Спектроскопические методы исследования.
15. Материалы на основе наноразмерных углеродных систем для электродов электрохимических источников тока.
16. Биосенсоры на основе наноструктурных материалов.
17. Пленки Лэнгмюра-Блоджет.
18. Графен. Методы исследования, перспективы использования.

### **Методика формирования итоговой оценки**

Итоговая оценка формируется на основе:

1. Правил проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования (постановление Министерства Образования Республики Беларусь № 53 от 29 мая 2012 г.);
2. Положения о рейтинговой системе оценки знаний студентов по дисциплине в Белорусском государственном университете (№ 382-ОД от 18.08.2015 г.);
3. Критериев оценки знаний и компетенций студентов по 10-бальной шкале.

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать проверку рефератов 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. Защита реферативных работ проводится в форме индивидуальных выступлений-презентаций с последующей дискуссией. Оценка рефератов проводится по десятибалльной шкале.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме зачета, к зачету допускаются студенты, чья оценка текущей успеваемости не менее 4 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)
Когерентная оптика и голография	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.)
Нанофотоника. Волоконная оптика	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.)

**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  
лазерной физики и спектроскопии  
д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ А.Л. Толстик

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

\_\_\_\_\_ В.М. Анищик