

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
(ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

УТВЕРЖДАЮ

Директор

С.В. Иванов



« 13 » 04 2022 г.

Рабочая программа факультативной дисциплины

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ, МОЛЕКУЛ, КЛАСТЕРОВ

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
по научной специальности 1.3.5 Физическая электроника

Принята решением Ученого совета
от 04.03.2022 № 03/22

Санкт-Петербург

2022 г.

Рабочая программа факультативной дисциплины «Лазерная спектроскопия атомов, молекул и кластеров» составлена на основании программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.3.5 Физическая электроника (далее – программа аспирантуры)

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями учебной дисциплины являются:

- создание у аспирантов комплекса знаний об оптических спектрах атомов, молекул и кластеров, об устройстве лазеров и методах лазерной спектроскопии, включая наиболее современные методы нелинейной лазерной спектроскопии и спектроскопии сверхбыстрых процессов;
- формирование представлений об особенностях строения атомов, молекул и кластеров, с точки зрения современной квантовой теории, электронной структуры атомов, молекул и кластеров, о тонкой и сверхтонкой структуре атомов и молекул, о влиянии внешних магнитных и электрических полей и об основных элементарных динамических процессах, протекающих в возбужденных состояниях атомов, молекул и кластеров под действием лазерного излучения: фотоионизация, фотодиссоциация, фотоассоциация;
- ознакомление аспирантов с последними достижениями в области и взаимодействия излучения с веществом физики поверхности и перспективами их применения в физической электронике, оптике, наноэлектронике, биофизике.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ АСПИРАНТУРЫ

Рассматриваемая дисциплина входит в факультативную часть программы аспирантуры с целью расширения и углубления научных и прикладных знаний аспирантов и организуется по выбору и желанию аспиранта.

При изучении дисциплины используются знания и навыки, полученные аспирантами при изучении курсов общей и теоретической физики и предшествующих курсов специальных дисциплин по специализации «Физическая электроника». Методической основой изучения дисциплины являются курсы электродинамики, квантовой физики, статистической физики и квантовой электронике.

Актуальность изучения дисциплины определяется важной ролью физики атомов, молекул и кластеров в современной науке и технике, необходимостью комплекса знаний и умений, приобретаемых в ходе изучения курса, для практических применений. Тематика курса соответствует приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники Российской Федерации: «Индустрия наносистем и материалов», «Науки о жизни».

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины «Лазерная спектроскопия атомов, молекул и кластеров» направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с программой аспирантуры:

знатъ:

- основные методы лазерной спектроскопии атомов, молекул и кластеров в газовой и конденсированной фазах;
- основы свойства лазерного излучения в широкой спектральной области;
- основы устройства и характеристики лазеров, применяемых для спектроскопии атомов, молекул и кластеров;
- основные методы, применяемые для расчета электронной структуры атомов и молекул, а также колебательной и вращательной структуры молекул и кластеров;
- основные явления и эффекты, наблюдающиеся в газовой и конденсированной фазах, обусловленные взаимодействием атомов, молекул и кластеров с лазерным излучением, их теоретическое описание и области практического применения;

уметь:

- определять основные характеристики атомов, молекул и кластеров в газовой и конденсированной фазе (в том числе электронную структуру и структуру колебательно-вращательных состояний) на основе анализа поглощения, люминесценции, комбинационного рассеяния и угловых распределений фотоэлектронов, а также распределений атомных и молекулярных фотофрагментов;
- феноменологически и теоретически описывать процессы одно- и многофотонного поглощения, комбинационного рассеяния, флуоресценции и фосфоресценции, а также процессы излучательной и безызлучательной релаксации в атомах, молекулах и кластерах;

владеть опытом:

- самостоятельного изучения и анализа специальной научной и методической литературы, связанной с проблемами физики атомов, молекул и кластеров;
- экспериментальных исследований свойств атомов, молекул и кластеров в газовой и конденсированной фазе на современном инновационном оборудовании

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

Приводимая ниже таблица показывает распределение бюджета учебного времени, отводимого на освоение основных разделов курса согласно учебному плану.

4.2. Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование разделов и тем	Трудоемкость (в ЗЕТ)	Объем работы (в часах)	Всего учебных занятий (в часах)			
			Лекции	Лаб. / практика	самостоятельная работа	контроль
1	2	3	4	5	6	7
Раздел 1. Строение и спектры атомов						
Тема 1.1 Основы теории строения многоэлектронных атомов.		17	7		10	
Тема 1.2. Оптические переходы в атомах и формы спектральных линий		15	5		10	
Тема 1.3. Основные физические эффекты, наблюдаемые при взаимодействии атомов с лазерным излучением.		16	6		10	
Всего по разделу		48	18		30	
Раздел 2. Строение и спектры молекул и кластеров						
Тема 2.1. Основы теории строения молекул и кластеров.		16	6		10	
Тема 2.2. Оптические переходы в молекулах и кластерах		16	6		10	
Тема 2.3. Основные физические эффекты, наблюдаемые при взаимодействии молекул и кластеров с лазерным излучением.		16	6		10	
Всего по разделу		48	18		30	
Раздел 3. Принципы и методы лазерной спектроскопии						
Тема 3.1. Свойства лазерного излучения и строение лазеров		16	6		10	
Тема 3.2. Нелинейная лазерная спектроскопия		16	6		10	
Тема 3.3. Фемтосекундная лазерная спектроскопия		16	6		10	
Всего по разделу		48	18		30	
Всего по дисциплине	4	144	54		90	Зачет

4.3. Содержание разделов и тем

Раздел 1. Строение и спектры атомов

Тема 1.1. Основы теории строения многоэлектронных атомов.

Уравнение Шредингера, волновые функции и уровни энергии атома водорода, симметрия и законы сохранения. Уравнение Шредингера для многоэлектронного атома, вари-

ационный принцип, систематика спектров многоэлектронных атомов, самосогласованное поле, уравнение Хартри-Фока. Электронные конфигурации, термы многоэлектронных атомов, четность волновой функции, правила отбора для дипольных радиационных переходов и их физический смысл, физический смысл правил отбора по квантовому числу М. Тонкая и сверхтонкая структура уровней энергии и спектральных линий.

Тема 1.2. Оптические переходы в атомах и формы спектральных линий

Оптические переходы в атомах, спектр электромагнитных колебаний, излучение абсолютно черного тела, поляризация электромагнитного излучения, оптические переходы и форма спектральных линий, коэффициенты Эйнштейна, интенсивность спектральных линий, поглощение и испускание, закон Ламберта-Бэра, механизмы уширения спектральных линий в газах и твердых телах, аналогия между электромагнитными колебаниями и движением атомных частиц, эксперимент с атомными частицами, волны Де-Бройля, интерференция волн материи.

Тема 1.3. Основные физические эффекты, наблюдаемые при взаимодействии атомов с лазерным излучением.

Многофотонные переходы, генерация гармоник, оптическая ориентация атомов, квантовый магнетометр, квантовый гироскоп, квантовый стандарт частоты, влияние внешних полей: эффект Штарка, эффект Зеемана, эффект Ханле, лазерное охлаждение атомов, квантовые биения, эффект пересечения уровней, фотоионизация атомов, ридберговские атомы, автоионизация атомов, надбарьерное поглощение, ионизация из внутренних оболочек, кулоновский взрыв.

Раздел 2. Строение и спектры молекул и кластеров

Тема 2.1. Основы теории строения молекул и кластеров

Волновые функции и уровни энергии молекулярного иона H_2^+ . Связывающие и антисвязывающие молекулярные орбитали. Симметрия одноэлектронных орбиталей, метод LCAO. Электронные конфигурации, волновые функции и термы многоэлектронной двухатомной молекулы. Химическая связь, электронные конфигурации и термы гомоатомных двухатомных молекул для элементов 1-го и 2-го периодов Периодической таблицы. Химическая связь, электронные конфигурации и термы гетероатомных двухатомных молекул. Связь симметрии молекул с их постоянным дипольным моментом и хиральностью. Симметрия электронных волновых функций молекул, таблицы характеров неприводимых представлений групп. Принцип Борна-Оппенгеймера. Колебательные волновые функции и уровни энергии двухатомной молекулы. Колебательные переходы в молекулах. Диаграмма

Яблонского. Вращательная структура спектров молекул: сферический жесткий ротатор, симметричный/линейный жесткий ротатор, асимметричный ротатор, нежесткий ротатор.

Тема 2.2. Оптические переходы в молекулах и кластерах

Правила отбора во вращательных спектрах двухатомных молекул, интенсивности во вращательных спектрах, колебательно-вращательные переходы в молекулах и кластерах. Электронные переходы в молекулах и кластерах, правила отбора для электронных переходов в двухатомных молекулах, принцип Франка-Кондона. Применения теории групп в молекулярной спектроскопии. Оценка значений интегралов от волновых функций, построение волновых функций молекулы, соответствующих симметрии ее гамильтониана, правила отбора для радиационных переходов в многоатомных молекулах и кластерах.

Тема 2.3. Основные физические эффекты, наблюдаемые при взаимодействии молекул и кластеров с лазерным излучением.

Томсоновское рассеяние, комбинационное рассеяние, генерация гармоник, КАРС. Диссоциация и преддиссоциация молекул и кластеров, угловые распределения продуктов фотодиссоциации. Ионизация и автоионизация молекул и кластеров. Влияние внешних полей: эффект Штарка, эффект Зеемана. Лазерное охлаждение молекул. Выстраивание осей молекул интенсивным лазерным излучением.

Раздел 3. Принципы и методы лазерной спектроскопии

Тема 3.1. Свойства лазерного излучения и строение лазеров.

Принципы получения лазерной генерации. Основные свойства лазерного излучения.

Устройство и принципы работы различных типов лазеров: твердотельные лазеры (рубиновый лазер, лазер на иттрий-алюминиевом гранате, лазер на неодимовом стекле), газовые лазеры (гелий-неоновый лазер, лазер на ионах аргона, лазер на углекислом газе), полупроводниковые лазеры, перестраиваемые лазеры (лазеры на растворах органических красителей, лазер на ионах титана в сапфире), эксимерные лазеры, лазер на свободных электронах. Принципы получения коротких и сверхкоротких лазерных импульсов (метод модуляции добротности, метод синхронизации мод).

Тема 3.2. Нелинейная лазерная спектроскопия.

Основные принципы нелинейной лазерной спектроскопии. Многофотонная лазерная спектроскопия поглощения, метод REMPI, метод ионных изображений. Комбинационное рассеяние в молекулах и кластерах, метод КАРС. Генерация гармоник. Спектроскопия насыщения. Оптоакустическая спектроскопия в растворах. Многофотонная ионизация молекул и кластеров интенсивным лазерным излучением.

Тема 3.3. Фемтосекундная лазерная спектроскопия.

Основные принципы фемтосекундной спектроскопии молекул, кластеров и биологических объектов в реальном масштабе времени. Метод pump-and-probe и его применения. Лазерно-индуцированная флуоресценция, регистрация времен жизни возбужденных молекул и кластеров. Исследование безызлучательных переходов в молекулах и кластерах в пико- и фемтосекундном временном диапазоне.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Технология процесса обучения по дисциплине «Лазерная спектроскопия атомов, молекул и кластеров» включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- а) аудиторные занятия (лекционно-семинарская форма обучения);
- б) самостоятельная работа студентов;
- в) контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончании.

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

Аудиторные занятия проводятся в интерактивной форме с использованием мультимедийного обеспечения (ноутбук, проектор) и технологии проблемного обучения.

Презентации позволяют качественно иллюстрировать практические занятия схемами, формулами, чертежами, рисунками. Кроме того, презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Электронная презентация позволяет отобразить процессы в динамике, что позволяет улучшить восприятие материала.

Самостоятельная работа организована в соответствие с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы;
- поиск научно-технической информации в открытых источниках с целью анализа и выявления ключевых особенностей.

Основные аспекты применяемой технологии проблемного обучения:

- постановка проблемных задач отвечает целям освоения дисциплины «Физика поверхности» и формирует необходимые компетенции;
- решаемые проблемные задачи стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Комплект оценочных средств для текущего контроля

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляется на протяжении семестра. Текущий контроль знаний аспирантов реализуется в виде выступлений на семинарах по индивидуальным домашним заданиям, ответам, проведением зачета.

Перечень контрольных вопросов, позволяющих оценить качество усвоения учебного материала:

1. Спектр электромагнитных колебаний, излучение абсолютно черного тела.
2. Поляризация электромагнитного излучения.
3. Коэффициенты Эйнштейна.
4. Закон Ламберта-Бэра.
5. Механизмы уширения спектральных линий в газах и твердых телах.
6. Волны Де-Бройля. Интерференция волн материи.
7. Квантовые биения.
8. Уравнение Шредингера для многоэлектронного атома.
9. Вариационный принцип.
10. Систематика спектров многоэлектронных атомов, самосогласованное поле.
11. Уравнение Хартри-Фока. Электронные конфигурации.
12. Термы многоэлектронных атомов, четность волновой функции, правила отбора для дипольных радиационных переходов и их физический смысл.
13. Физический смысл правил отбора по квантовому числу M.
14. Тонкая структура уровней энергии и спектральных линий.
15. Оптическая ориентация атомов.
16. Сверхтонкая структура уровней энергии и спектральных линий.
17. Квантовый стандарт частоты.
18. Эффекты Штарка и Зеемана.
19. Радиационные переходы, электрическое дипольное и мультипольное излучение, правила отбора для магнитодипольного излучения.
20. Связывающие и антисвязывающие молекулярные орбитали.
21. Симметрия одноэлектронных орбиталей, метод LCAO.
22. Электронные конфигурации, волновые функции и термы многоэлектронной двухатомной молекулы.

23. Химическая связь, электронные конфигурации и термы гомоатомных двухатомных молекул для элементов 1-го и 2-го периодов Периодической таблицы.
24. Принцип Борна-Оппенгеймера.
25. Колебательные волновые функции и уровни энергии двухатомной молекулы. Колебательные переходы в молекулах.
26. Вращательная структура спектров молекул.
27. Правила отбора во вращательных спектрах двухатомных молекул.
28. Правила отбора для электронных переходов в двухатомных молекулах.
29. Принцип Франка-Кондона.
30. Диссоциация и преддиссоциация молекул.
31. Комбинационное рассеяние.
32. Генерация гармоник.
33. Спектроскопия КАРС
34. Свойства лазерного излучения, типы лазеров.
35. Лазер на свободных электронах.
36. Детекторы излучения.
37. Фотоэлектронная спектроскопия.
38. Абсорбционная спектроскопия.
39. Внутрирезонаторная спектроскопия.
40. Фотоакустическая спектроскопия.
41. Лазерно-индукционная флуоресценция.
42. Ионизационная спектроскопия.
43. Рамановская спектроскопия.
44. Спектроскопия квантовых биений и спектроскопия пересечения уровней
45. Фемтосекундная лазерная спектроскопия

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. И. И. Собельман, Введение в теорию атомных спектров, Наука, 1973.
2. М. А. Ельяшевич, Атомная и молекулярная спектроскопия, Физматгиз, 1962.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Наука, 1974.
4. Н. Ф. Степанов, Квантовая механика и квантовая химия, - М. Мир, Издатель-

ство Московского университета, 2001.

7.2. Дополнительная литература

1. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules, 2-nd ed., 1989.
2. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure. III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules, 1988.
3. W. Demtröder, Laser Spectroscopy, 1996.
4. D. A. McQuarrie, J.D.Simon, Physical Chemistry: a Molecular Approach, 1997.

7.3. Интернет-ресурсы

Отечественные журналы:

1. Известия вузов. Материалы электронной техники (<http://met.misis.ru/index.php/jour>; доступ с 2012 по текущий год)

2. Квантовая электроника (<http://www.quantum-electron.ru/pa.phtml?page=onlcont>; доступ с 1971 по 2012)

3. Микроэлектроника (http://elibrary.ru/title_about.asp?id=7900; доступ с 2007 по текущий год) Отечественные журналы в переводе:

1. Quantum Electronics (<http://iopscience.iop.org/1063-7818/>; доступ с 1971 по текущий год)

2. Russian Microelectronics (<http://link.springer.com/journal/11180>; доступ с 2009 по текущий год)

Иностранные журналы:

1. Advanced Electronic Materials

<http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/%28ISSN%292199-160X>;

2. IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering
<http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/%28ISSN%291931-4981>;

3. Journal of Electronic Materials (<http://link.springer.com/journal/11664>);

4. Microelectronic Engineering

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01679317>;

5. Microelectronics Journal (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00262692>);

6. Microwave Journal (<http://www.microwavejournal.com/publications>);

7. Nature Photonics (<http://www.nature.com/nphoton/index.html>);

7. Opto-Electronics Review (<http://link.springer.com/journal/11772>);

8. Progress in Quantum Electronics;

(<http://www.sciencedirect.com/science/journal/0079672>;

9. Solid-State Electronics (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00381101>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Лекционная аудитория
2. Мультимедийный проектор
3. Персональный компьютер
4. Компьютерный класс
5. Учебно-научная лаборатория, оборудованная аппаратурой для исследования свойств атомов молекул, кластеров и биологических объектов методами лазерной спектроскопии.

Программу разработал:

г.н.с., заведующий лабораторией
лаб. атомных столкновений в твердых телах,
д-р физ. - мат. наук Зиновьев А.Н.