

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Фотофизика и фотохимия органических и неорганических веществ и материалов
по направлению:	Материаловедение и технологии материалов
профиль подготовки:	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: В.А. Надточенко, д-р хим. наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики 27.05.2021

Аннотация

Курс "Фотофизика и фотохимия органических и неорганических веществ и материалов" предусматривает ознакомление с фундаментальными знаниями о строении вещества, взаимодействии света с веществом, фотофизике и фотохимии органических и неорганических веществ и материалов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Цель дисциплины - ознакомление с фундаментальными знаниями о строении вещества, взаимодействии света с веществом, фотофизике и фотохимии органических и неорганических веществ и материалов.

Задачи дисциплины

Формирование научных знаний о строении вещества и о взаимодействии света с веществом.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в области материаловедения и технологии материалов	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- теоретические основы теории строения вещества;
- теоретические основы теории взаимодействия света с веществом.

уметь:

- планировать стратегию исследования состава вещества и идентификации его компонент;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества с использованием основных методологических принципов;
- использовать современные методики сбора, очистки и обработки данных;
- готовить наглядные презентации полученных результатов.

владеть:

- теоретическими знаниями строения вещества о взаимодействии света с веществом;
- практическими навыками интерпретации экспериментальных данных о спектрах, составе и морфологии вещества, практическими знаниями о методах сканирующей зондовой, оптической и электронной микроскопии;
- навыками поиска в химических базах данных;
- типовыми приемами обработки и анализа результатов физико-химического и вычислительного эксперимента;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических и математических методов исследования строения и состава вещества.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Атом, молекула, кристалл. Квантово-механическое описание: гамильтониан, уравнение Шредингера для атома, молекулы, кристалла. Волновые функции.	4			2
2	Адиабатическое приближение	4			6
3	Взаимодействие квантованного электромагнитного поля с атомом, молекулой, твердым телом	4			2
4	Основы оптической спектроскопии. Модель 2-х уровневого атома	2			2
5	Эффект окружающей среды на молекулярные спектры	2			4
6	Спектры поглощения пигментов и восприятие цвета	2			2
7	Фотохимические реакции	4			2
8	Фотоионизация	2			4
9	Элементарные представления о фотокатализе	2			2
10	Перенос энергии электронного возбуждения	2			2
11	Фотоиндуцированные процессы окисления органических соединений	2			2
Итого часов		30			30
Подготовка к экзамену		30 час.			

Общая трудоёмкость	90 час., 2 зач.ед.
--------------------	--------------------

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Атом, молекула, кристалл. Квантово-механическое описание: гамильтониан, уравнение Шредингера для атома, молекулы, кристалла. Волновые функции.

Тема лекции систематизирует элементарные физические знания у студентов о квантово-механическом описании строения, квантового состояния и энергетических уровнях атома, молекулы, кристалла. Дается сравнение трёх систем, отмечаются их особенности и общность

2. Адиабатическое приближение

Физическое обоснование и математическая формулировка адиабатического приближения в квантово-механическом описании квантового состояния и энергетических уровнях молекул. Вводится понятие поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Дается объяснение границ применимости адиабатического приближения

3. Взаимодействие квантованного электромагнитного поля с атомом, молекулой, твердым телом

Элементарные представления об электромагнитном излучении, сообщаются характерные величины частот и длин волн различных оптических диапазонов, величины энергии, импульса кванта света. Сообщается о поляризации света. Модель Эйнштейна для описания коэффициентов поглощения, спонтанного и вынужденного излучения. Поглощение, излучение света и безизлучательные переходы в атоме, молекуле, твердом теле. Дипольный момент и оптический дипольный момент. Правила отбора для индуцируемых светом внутримолекулярных переходов. Принцип Франка-Кондона для оптических переходов.

4. Основы оптической спектроскопии. Модель 2-х уровневого атома

Спектральная линия. Сечения оптических переходов, коэффициент экстинкции, коэффициент диэлектрической проницаемости. Однородное и неоднородное уширение. Классификация оптических переходов в органических молекулах, металлокомплексах.

5. Эффект окружающей среды на молекулярные спектры

Полярное и неполярное молекулярное окружение. Гидрофильность и гидрофобность.

Диполь в электрическом поле. Эффект Штарка.

Представления о теории сольватации Лорентца, Дебая, Онзагера. Современные континуальные модели сольватации.

Динамика сольватации возбужденных состояний. Динамический Stokes сдвиг. Элементарные представления о специфической сольватации

6. Спектры поглощения пигментов и восприятие цвета

Теоретические представления о спектрах поглощения пигментов и восприятии цвета. Элементарные представления о фотохимии и физиологии зрения.

7. Фотохимические реакции

Фотохимические реакции - переноса электрона, фотодиссоциации, фотополимеризации, фотоизомеризации, фотохромизм, фотохимия металлокомплексов, образование и распад эксимеров и эксиплексов.

Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта

8. Фотоионизация

Ионизация жестким излучением, представления об элементарных процессах в радиационной химии. Многофотонная ионизация и туннельная ионизация в сильном поле лазера.

9. Элементарные представления о фотокатализе

Фотохимические и фотокаталитические процессы

10. Перенос энергии электронного возбуждения

Механизмы переноса: диполь-дипольный (Фёрстера), обменный (Декстера), экситонный механизм переноса. Экситонные состояния в молекулярных агрегатах, молекулярных кристаллах

11. Фотоиндуцированные процессы окисления органических соединений

Механизмы фотоиндуцированного окисления органических соединений, фотодеструкция полимеров. Интермедиаты в окислении. Ингибиторы окисления.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, снабженная доской, экраном, проектором.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М. : Наука, 1989, 767 с. Гл. III, VI, VIII-XI.
2. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001, 519 с.
3. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997, 558 с.

Дополнительная литература

4. Майер И. Избранные главы квантовой химии М.: БИНОМ, 2006, 384с. Гл. 1, 2.
5. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968, 435 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Не предусмотрено.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Материаловедение и технологии материалов
профиль подготовки:	Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	В.А. Надточенко, д-р хим. наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в области материаловедения и технологии материалов	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Фотофизика и фотохимия органических и неорганических веществ и материалов» обучающийся должен:

знать:

- теоретические основы теории строения вещества;
- теоретические основы теории взаимодействия света с веществом.

уметь:

- планировать стратегию исследования состава вещества и идентификации его компонент;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества с использованием основных методологических принципов;
- использовать современные методики сбора, очистки и обработки данных;
- готовить наглядные презентации полученных результатов.

владеть:

- теоретическими знаниями строения вещества о взаимодействии света с веществом;
- практическими навыками интерпретации экспериментальных данных о спектрах, составе и морфологии вещества, практическими знаниями о методах сканирующей зондовой, оптической и электронной микроскопии;
- навыками поиска в химических базах данных;
- типовыми приемами обработки и анализа результатов физико-химического и вычислительного эксперимента;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических и математических методов исследования строения и состава вещества.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы для проведения экзамена:

1. Гамильтониан атома водорода, атома гелия. Атомные уровни
2. Гамильтониан молекулы
3. Гамильтониан твердого тела. Функция Блоха
4. Адиабатическое приближение в задаче кв. состояниях в молекуле. Электронные и колебательные волновые функции. Применимость адиабатического приближения.
5. Поверхность потенциальной энергии молекулы. Оптический переход, принцип Франка-Кондона.
6. Шкала длин волн и частот электромагнитного излучения. Энергия и импульс кванта света (порядки величины).
7. Модель Эйнштейна для описания коэффициентов поглощения, спонтанного и вынужденного излучения.
8. Поглощение, излучение света и безизлучательные переходы в атоме, молекуле, твердом теле.
9. Дипольный момент и оптический дипольный момент. Правила отбора для индуцируемых светом внутримолекулярных переходов.
10. Модель 2-х уровневого атома.
11. Спектральная линия. Сечения оптических переходов, коэффициент экстинкции, коэффициент диэлектрической проницаемости.
12. Однородное и неоднородное уширение.
13. Классификация оптических переходов в органических молекулах, металлокомплексах.
14. Эффект окружающей среды на молекулярные спектры. Полярное и неполярное молекулярное окружение. Гидрофильность и гидрофобность
15. Диполь в электрическом поле. Эффект Штарка
16. Представления о теории сольватации Лорентца, Дебая, Онзагера. Современные континуальные модели сольватации
17. Динамика сольватации возбужденных состояний. Динамический сдвиг Стокса.
18. Элементарные представления о специфической сольватации.
19. Теоретические представления о спектрах поглощения пигментов и восприятии цвета.
20. Элементарные представления о фотохимии и физиологии зрения.
Фотохимические реакции- перенос электрона. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
21. Фотохимические реакции- фотодиссоциация. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
22. Фотохимические реакции- фотополимеризация. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
23. Фотохимические реакции- фотоизомеризация. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
24. Фотохимические реакции- фотохромизм. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
25. Фотохимические реакции- металлокомплексов. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
26. Фотохимические реакции- образование и распад эксимеров и эксиплексов. Общие представления о модельных поверхностях потенциальной энергии фотохимического акта.
27. Фотоионизация. Ионизация жестким излучением, представления об элементарных процессах в радиационной химии.
28. Многофотонная ионизация и туннельная ионизация в сильном поле лазера.
29. Элементарные представления о фотокатализе.
30. Перенос энергии электронного возбуждения. Механизмы переноса: диполь-дипольный.
31. Перенос энергии электронного возбуждения. Механизмы переноса: обменный.
32. Перенос энергии электронного возбуждения. Механизмы переноса: экситонный.

33. Механизмы фотоиндуцированного окисления органических соединений, фотодеструкция полимеров.
34. Интермедиаты в окислении. Ингибиторы окисления.
35. Общие представления о коллоидах - поверхностный заряд, двойной слой, электрокинетические свойства наночастиц. Стабильность коллоидов. Теория Дерягина-Ландау-Вервея-Овербека (Derjaguin–Landau–Verwey–Overbeek DLVO). Стерическое отталкивание в коллоиде.
36. Наноразмерные системы. 0D, 1D, 2D и 3D размерность? Плотность состояний и оптические свойства наночастиц и наноструктур.
37. Полупроводниковые наночастицы - квантовые точки. спектральные свойства и размерные эффекты.
38. Экситоны в кристалле твердого тела. Боровский радиус экситона. Эффект квантового ограничения (Quantum confinement).

Примеры экзаменационных билетов.

Пример 1.

1. Элементарные представления о фотокатализе.
2. Интермедиаты в окислении. Ингибиторы окисления.

Пример 2.

1. Модель 2-х уровневого атома.
2. Спектральная линия. Сечения оптических переходов, коэффициент экстинкции, коэффициент диэлектрической проницаемости.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 60 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету не должен превышать одного астрономического часа.