

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Теория симметрии

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки :

Фундаментальная физика

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-2 Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные.

ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 2.2 Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования.

ИПК 1.1 Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить математический аппарат необходимый для понимания молекулярной спектроскопии.

– Научиться применять практические навыки для молекул различных симметрий.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Пятый семестр, зачет

Шестой семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: линейная алгебра, математический анализ, в 6 ом семестре основ квантовой механики.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

– лекции: 32 ч.;

– практические занятия: 32 ч.;

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Введение в теорию групп, определение группы, примеры групп. Подгруппа и прямое произведение групп. Порядок группы и таблица умножения групп. Группы порядка 3 и 4. Группы порядка 5, 6 и 7. Циклические группы. Группа D₃.

Тема 2. Сопряженные элементы и классы сопряженных элементов. Примеры классов. Смежные классы и теорема Лагранжа. Группа перестановок. Изоморфные группы. Примеры симметричных молекул.

Тема 3. Теорема о перечислении групп, точечные группы. Полная ортогональная группа. Точечные группы первого рода. Примеры. Какие повороты могут принадлежать к одному классу. Формула для операции $GR\mathbf{k}(f)G^{-1}$, где $R\mathbf{k}(f)$ поворот вокруг оси \mathbf{k} на угол f . Двухсторонние оси.

Тема 4. Примеры групп D_n , T , O . Разбиение на классы сопряженных элементов. Эквивалентные повороты. Примеры.

Тема 5. Полная ортогональная группа, инверсия, отражения, два свойства для оператора вращения: $\sigma_h R(\mathbf{f}) \sigma_h^{-1} = R(\mathbf{f})$ и $\sigma_v R(\mathbf{f}) \sigma_v^{-1} = R(-\mathbf{f})$. Группы второго рода. S_{2n} , C_{nh} , C_{nv} , D_{nh} , D_{nd} . Разбиение на классы сопряженных элементов.

Тема 6. Группы T_d , O_h , предельные группы C_{inf} , C_{infh} , D_{inf} , D_{infh} . Разбиение на классы сопряженных элементов. Группа симметрии некоторых молекул.

Тема 7. Линейные операторы. Представления. Матричные представления. Представления группы D_3 . Эквивалентные представления. Теорема Машке. Примеры представлений.

Тема 8. Неприводимые и приводимые представления. Леммы Шура. Доказательство первой леммы Шура. Свойства ортогональности неприводимых представлений.

Тема 9. Характер представления. Соотношение ортогональности для характеров неприводимых представлений. Таблицы характеров неприводимых представлений. Формула для разложения на неприводимые представления. Прямое произведение двух представлений и его характер. Примеры разложения на неприводимые представления.

Тема 10. Регулярное представление, доказательство равенства числа представлений числу классов. Примеры разложения на неприводимые представления. Ортогональность базисных функций.

Тема 11. Вектор и псевдовектор, вывод формулы для характера колебаний молекул, получение представлений нормальные колебаний. Примеры нахождения симметрии нормальных колебаний молекул AB_2 , AB_3 и других симметричных молекул.

Тема 12. Проекционные операторы. Три типа проекционных операторов. Симметризованные координаты и их построение с помощью проекционных операторов. Примеры нахождения симметризованных координат молекул AB_2 , AB_3 (плоская)

Тема 13. Симметрия кристаллов. Группа трансляции, дискретные группы. Основные вектора. Объем построенного на основных векторах параллелепипеда.

Тема 14. Векторные группы, точечная группа K переводящая векторы векторной группы. Семь сингоний, соответствующих группам S_2 , C_{2h} , D_{2h} , D_{3h} , D_{4h} , D_{6h} и O_h . Почему в группе могут быть только оси 2, 3, 4 и 6 го порядков. Лемма. Если группа K содержит подгруппу C_n ($n > 2$), то она содержит и подгруппу C_{nv}

Тема 15. Симметрия и типы векторных групп (сингонии и типы). Пример моноклинная сингония C_{2h} . Введение в симметрию кристаллов.

Тема 16. Полная перестановочно – инверсионная группа. Примеры молекул различной симметрии.

Тема 17. Ядерные статистические веса. Получение ядерных статистических весов для симметричных молекул.

Тема 18. Коэффициенты Клебша – Гордана. 3Г символы. Теорема вигнера Экарта. Симметрия колебательно вращательных уровней. Обозначения.

Тема 19. Симметрия дипольного момента в лабораторной и молекулярно фиксированной системе координат. Правила отбора дипольных переходов.

Тема 20. Непрерывные групп и их представления. Инфинитезимальные операторы. Структурные константы.

Тема 21. Пример представлений. Инфинитезимальные операторы и характер неприводимых представлений группы R_3 .

Тема 22. Метод неприводимых тензорных операторов. Симметрия поверхности потенциальной энергии. Симметризованные степени.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине осуществляется путем контроля посещаемости, проведения практических работ и тестов по лекционному материалу и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в первом семестре проводится по результатам выполнения текущего контроля по дисциплине.

Экзамен во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1,5 часа. Каждый билет содержит по два устных вопроса и одну задачу, проверяющих усвоение тем образовательной программы и наличие компетенций в соответствии с ИОПК-2.2 и ИПК-1.1.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Ссылка на страницу курса в электронном университете «Moodle»: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22001>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

Тема 1 и 2. Примеры конечных и бесконечных групп. Разбиение на классы группы D_3 . Таблица умножения группы D_3 .

Тема 5. Пример разложения на классы сопряженных элементов для C_{nv} , D_{nh} , D_{nd} . Определение группы симметрии молекулы. Симметрия мгновенной конфигурации молекулы в квантовой химии. Примеры.

Тема 7. Неприводимые и приводимые представления группы D_3 .

Тема 9. Примеры разложения на неприводимые представления для групп D_3 , C_{3v} , T_d

Тема 11. Примеры нахождения симметрии нормальных колебаний молекул ABC_2 , AB_4 и других симметричных молекул.

Тема 12. Получение симметризованных координат молекул PH_3 , CH_4 , CH_3Cl

Тема 17. Получение ядерных статистических весов для молекул PD_3 , CCl_4 , $CHCl_3$.

Тема 19. Примеры правила отбора дипольных переходов для некоторых симметричных молекул.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Любарский Г.Я Теория групп и ее применение в физике. Издательство Физ.-Мат литературы Москва 1958 354 с.

- Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике, Издательств мир 1983 год

б) дополнительная литература:

– Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия / М: Издательство «Мир».1981.451с.

– Bunker P.R., Jensen P. Fundamentals of Molecular Symmetry / London: IOP Publishing.2005.358p.

в) ресурсы сети Интернет:

– Информационная система SPECTRA: <https://spectra.iao.ru>

– Спектроскопическая база HITRAN: <https://hitran.org>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

- б) информационные справочные системы:
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
 - ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Никитин Андрей Владимирович, доктор физ.-мат. наук, Томский государственный университет, кафедра оптики и спектроскопии, профессор