



Кафедра молекулярной спектроскопии

molsp.phys.spbu.ru

05 «Физические методы и информационные технологии
в исследованиях окружающей среды»

Примерные темы курсовых работ

1. *Градусник для Венеры*

Филиппов Николай Николаевич (n.filippov@spbu.ru, корп. А, к.106)

Температуру различных слоев атмосферы Земли можно измерить обычным градусником, разместив его на медленно взлетающем воздушном шаре. А как быть с другими планетами? Поможет нам в этом молекулярная спектроскопия. Дело в том, что вид молекулярных спектров чувствителен к температуре газа. Каким образом это можно использовать для создания «градусника для Венеры», является содержанием настоящей работы.



2. *Колебательный спектр линейных молекул*

Меликова Сона Меджидовна (melikova@molsp.phys.spbu.ru, корп. А, к. 236)



Задачей работы является расчет колебательных частот и форм нормальных колебаний линейной трехатомной молекулы, в частности симметричной молекулы CO_2 и ее изотопных модификаций. Решение этой задачи важно для дальнейшего изучения молекулярной спектроскопии и имеет приложение в физике атмосферы и физике лазеров.

3. **Инфракрасные спектры воды**

Меликова Сона Меджидовна (melikova@molsp.phys.spbu.ru, корп. А, к. 236)

Задачей работы является получение инфракрасных спектров нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) двух изотопных модификаций воды (H_2O и D_2O). В ходе работы нужно будет изучить принцип явления НПВО, освоить практическую работу на ИК спектрометре, получить и обработать спектры, сравнить частоты колебательных переходов двух изотопных модификаций воды.

4. **Инфракрасные спектры двухатомных молекул в газовой фазе**

Асфин Руслан Евгеньевич (R.Asfin@spbu.ru, корп. А, ком. 201)

В данной работе предлагается ознакомиться с методиками регистрации спектров в газовой фазе, работе на современных спектральных приборах. В качестве примера предполагается зарегистрировать спектр какой-нибудь из двухатомных молекул. Студенту, выбравшему данную тему учебной практики, будет предложено разобраться в принципах формирования полученных спектров и понять, какую информацию о молекуле можно получить из полученных данных. В перспективе, планируется привлечение этого студента к научной работе по получению коэффициентов сдвига и уширения линий ряда молекул, возмущенных различными буферными газами. Такие работы часто поддерживаются различными научными фондами, а статьи с такими данными охотно публикуются высокорейтинговыми спектроскопическими журналами.



5. **Экспериментальная проверка закона Бугера — Ламберта — Бера**

Асфин Руслан Евгеньевич (R.Asfin@spbu.ru, корп. А, ком. 201)

Закон Бугера-Ламберта-Бера – один из основных законов, используемых в спектроскопии. Этот закон связывает интенсивность прошедшего через образец света с интенсивностью падающего на него излучения, толщиной образца, концентрацией поглощающих частиц и их коэффициентом поглощения. В работе предлагается научиться азам регистрации спектров на современных спектральных приборах, подготовки образцов, обработки полученных спектров. На нескольких примерах будет проверен закон Бугера-Ламберта-Бера и условия его выполнения.

6. Современные методы разделения света по длинам волн для целей спектрального анализа

Тохадзе Константин Григорьевич (K.Tokhadze@spbu.ru, корп. А, 204)



Студент проведет теоретический и экспериментальный анализ работы спектральных приборов: классических, в которых для разделения полихроматического света используются призмы и дифракционные решетки, и Фурье-спектрометра, где нет диспергирующего элемента, весь спектр регистрируется одновременно (на первом этапе идет регистрация интерферограммы излучения, а затем - с помощью Фурье-преобразования вычисляется спектр).

7. Исследование факта образования молекулярных комплексов по изменению характера вращения молекул в спектрах поглощения

Тохадзе Константин Григорьевич (K.Tokhadze@spbu.ru, корп. А, 204)

Планируется рассчитать изменение вращательных постоянных при образовании молекулярных комплексов фтористого водорода (HF) в газе и сжиженном криптоне и оценить возможное изменение колебательно-вращательного спектра комплекса В...HF.

8. Изучение «зонтичного» колебания ядер в молекуле аммиака NH₃

Булычев Валентин Петрович (V.Bulychev@spbu.ru, корп. А, 104)

Равновесная конфигурация ядер в молекуле аммиака имеет форму правильной треугольной пирамиды. Нас будет интересовать колебание ядер, при котором молекула выворачивается как зонтик на ветру. **С использованием этого колебания аммиака был построен один из первых квантовых генераторов (мазер).** При этом колебании ядро атома азота проходит сквозь плоскость, в которой расположены ядра атомов водорода. Это колебание происходит в молекуле всегда, даже при $T = 0$, и является сложным квантовым движением. Целью курсовой работы является упрощенное описание этого колебания без решения квантово-механических уравнений и получение оценки частоты излучения мазера. В частности, три ядра атомов водорода можно заменить одним гипотетическим ядром, расположенным на оси молекулы, что сводит задачу к рассмотрению колебания двухатомной молекулы.



9. Разделение изотопов методом центрифугирования газовых смесей

Булычев Валентин Петрович (V.Bulychev@spbu.ru, корп. А, 104)

Задача разделения изотопов элементов и молекул, содержащих разные изотопы элементов, имеет огромное практическое значение. Метод разделения изотопов на газовых центрифугах является одним из наиболее эффективных. Например, так разделяются изотопы инертных газов. Для разделения изотопов углерода, кремния, урана и многих других элементов используют газы CH_4 , SiH_4 , UF_6 и т.д. Теория метода центрифугирования, основанная на зависимости центробежной силы от масс молекул, вполне доступна студентам 1-го курса. При выполнении курсовой работы нужно понять эту теорию и основные формулы и на их основе оценить эффективность разделения, например, молекул легкой воды H_2O и тяжелой воды D_2O .

10. Природа взаимодействия молекул

Бутурлимова Марина Валерьевна (M.Buturlimova@spbu.ru, корп. А, к. 208)



Взаимодействие молекул характеризуется потенциалом взаимодействия. Планируется провести моделирование взаимодействия двухатомных молекул с атомами инертных газов с помощью атом-атомного взаимодействия, используя метод наименьших квадратов.

11. Состав атмосферы и вторая космическая скорость

Тоухадзе Ирина Константиновна (iktpen1@yandex.ru, корп. А, к. 201)

Используя распределение Максвелла (распределение молекул по скоростям) посчитать долю молекул, имеющих скорость больше скорости убегания (второй космической). Так как нужный интеграл (от $e^{-\alpha x^2}$) нельзя взять аналитически, в работе надо написать программу для расчета интеграла численными методами. Провести расчеты для разных атмосферных молекул в условиях разных планет. Убедиться, что полученные результаты соответствуют составу атмосфер планет Солнечной системы.



12. Моделирование структуры аргона, используя методы компьютерного моделирования

Тохадзе Ирина Константиновна (iktpen1@yandex.ru, корп. А, к. 201)

Познакомиться с компьютерным моделированием методом Монте Карло — методом, позволяющим моделировать твердые тела, жидкости и растворы. Провести расчеты для однокомпонентной системы, состоящей из атомов аргона. Рассмотреть полученную трехмерную структуру аргона при нескольких температурах.

13. Феноменологическая модель макроскопической поляризации. Нелинейные эффекты

Рутковский Константин Станиславович (K.Rutkovsky@spbu.ru, корп. П, 139)



Предполагается рассмотреть феноменологическую модель макроскопической поляризации. Для начала будет определен тензор линейной диэлектрической восприимчивости, затем это определение будет расширено на восприимчивости n -го порядка. При таком рассмотрении в среде возникают нелинейные по величине напряженности электромагнитного поля оптические эффекты. В частности будут проанализирована квадратично нелинейная среда, в которой возможны такие эффекты как генерация второй гармоники, генерация разностной частоты, генерация суммарной частоты, оптическое выпрямление. Также будут затронуты эффекты, связанные с поляризацией третьего порядка: генерация третьей гармоники, самофокусировка света.

14. Неупругое рассеяние фотонов на молекулах: линейная и нелинейная спектроскопия комбинационного рассеяния (КР)

Коузов Александр Петрович (A.Kouzov@spbu.ru, корп. А, к.104)

В данной работе предполагается рассмотреть историю открытия явления КР, физику явления КР (краткая качественная и количественная теория); понять откуда берутся интенсивности и поляризационные свойства полос в спектрах КР. Разобраться с прогрессом техники КР, обусловленным использованием лазеров и новых методов регистрации. Описать спектроскопию КР как метод исследования динамики изолированных молекул и реальных сред. Рассмотреть новые варианты КР, основанные на нелинейных откликах света (Raman-gain/loss spectroscopy)



15. Нелинейная оптическая спектроскопия четырехволнового смешения

Коузов Александр Петрович (A.Kouzov@spbu.ru, корп. А, к.104)

В данной работе предполагается рассмотреть основы физики 4-х волнового смешения (Four-Wave Mixing). Для этого нужно будет описать практические схемы регистрации FWM, вырожденное (Degenerate FWM) и двухчастотное (Two-Color FWM) смешение, а также резонансное усиление наблюдаемых откликов. Привести примеры практического применения FWM для дистанционной диагностики нагретых газов (ракетные сопла, двигатели внутреннего сгорания)

16. Проявление вандерваальсовых взаимодействий в молекулярных колебаниях с большой амплитудой

Денисов Глеб Семенович, (gldenisov@yandex.ru, корп. А, к. 203)



При колебаниях с большой амплитудой атомы периодически расходятся на значительные расстояния, когда короткодействующие валентные силы становятся пренебрежимо малыми по сравнению с вандерваальсовым притяжением. Это сказывается на положении колебательных уровней и экспериментально измеряемых частотах. Задача работы – анализ частот двухатомной молекулы и оценке расстояния, на котором меняется закон взаимодействия между атомами.

17. Влияние вращения метильной группы на переход протона во внутримолекулярной водородной связи. Расчёт профиля потенциальной энергии

Тупикина Елена Юрьевна (elenatupikina@gmail.com, к.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры физической органической химии, институт химии СПбГУ)

Вращение фрагментов молекул друг относительно друга обуславливает существование различных конформаций молекулы, каждое из которых характеризуется определённым значением потенциальной энергии. Получив профиль потенциальной энергии (вдоль одной или нескольких координат) по положениям минимумов и максимумов можно определить, какие конформации будут стабильными, а какие нет, оценить величину барьеров внутреннего вращения. В рамках курсовой работы мы рассмотрим, как вращение



группы CH_3 вокруг связи С-С влияет на положение атома водорода во внутримолекулярной водородной связи $\text{OH}\cdots\text{O}$.

18. Исследование структуры активного центра антиоксидантного фермента глутатионпероксидазы

Тупикина Елена Юрьевна (elenatupikina@gmail.com, к.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры физической органической химии, институт химии СПбГУ)

Селен – один из необходимых человеку микроэлементов. Дефицит селена в организме приводит к развитию сердечной недостаточности, а также к целому ряду других заболеваний, в том числе сердечно-сосудистых и нейродегенеративных. В организме человека селен чаще всего обнаруживается в составе остатка аминокислоты – селеноцистеина. Селеносодержащие протеины, которые «строятся» в том числе и из остатков селеноцистеина, ответственны за защиту нашего организма от окислительного стресса. В рамках данной курсовой работы предлагается познакомиться со структурой одного из селенопротеинов – глутатионпероксидазы, а также изучить её строение и принцип работы с использованием методов квантовой химии.