



Кафедра молекулярной спектроскопии

molsp.phys.spbu.ru

Примерные темы курсовых работ для выполнения на 3 курсе по направлению "Физика"

1. Колебательные спектры современных анестетиков

Рутковский Константин Станиславович

Действие современных летучих анестетиков основано на блокировании в живом организме каналов передачи болевых ощущений. Возможный механизм процесса основан на обратимом взаимодействии анестетика с молекулой мишенью, в результате которого образуется слабая водородная или ван дер Ваальсовская связь. С точки зрения спектроскопии это может приводить к качественным изменениям в колебательном спектре взаимодействующей системы анестетик-мишень. В работе предполагается изучить часть спектра, образуемого колебаниями группы С-Н анестетика, ответственной за избирательное связывание с мишенью. Предполагается использовать методы ИК спектроскопии и комбинационного рассеяния.

2. Инверсная заселенность

Рутковский Константин Станиславович

Предполагается рассмотреть феноменологическую модель поглощения и испускания света, и получить соотношения для основных коэффициентов Эйнштейна. Для 3-х уровневой схемы будут рассмотрены процессы поглощения и безизлучательной передачи возбуждения и выведены скоростные уравнения. В результате анализа стационарных решений уравнений будет получено условие инверсии заселенности, необходимое для возникновения генерации на рабочем переходе.

3. Инфракрасные спектры двухатомных молекул в газовой фазе

Асфин Руслан Евгеньевич

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, 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.

4. Колебательные спектры кристаллов фосфиновых кислот

Асфин Руслан Евгеньевич

В данной работе студенту предлагается ознакомиться с различными методами регистрации колебательных спектров, в т.ч. спектроскопии поглощения, спектроскопии нарушенного полного отражения, комбинационного рассеяния. В качестве закрепления новых знаний студенту будет предложено зарегистрировать спектры фосфиновых кислот на современных спектральных приборах. Фосфиновые кислоты образуют одни из самых сильных водородных связей: невалентных межмолекулярных взаимодействий, играющих важнейшую роль в биологических, химических и технологических процессах. В перспективе, планируется привлечение студента к научной работе по изучению фосфиновых кислот и родственных веществ, к участию в написании статей и выполнению научных грантов.

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

Тохадзе Константин Григорьевич

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).

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

Тохадзе Константин Григорьевич

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.

7. Квантово-механический расчет комплексов молекул воды или углекислого газа

Булычев Валентин Петрович

Такой расчет дает информацию о межмолекулярном взаимодействии, что позволяет решить многие интересные задачи. Например, почему плотность воды максимальна при 4 град Цельсия, а не при нуле. Благодаря этому вода зимой не промерзает до дна и рыба не погибает. Что касается CO₂, то знание энергии межмолекулярного взаимодействия позволяет объяснить, почему этот газ становится жидким (точнее, флюидом в сверхкритической фазе) при T > 31 град Цельсия и давлении P > 73 атм. В этом состоянии CO₂ становится удобным (не ядовитым) растворителем и используется для извлечения кофеина из зерен кофе.

8. Квантово-механический расчет простейших комплексов с водородной связью

Булычев Валентин Петрович

Для понимания механизмов биологических процессов очень важно изучать явление водородной связи (Н-связи), играющую ключевую роль в таких процессах. Студентам предлагаются задачи квантово-механического расчета простейших комплексов (димеров) с Н-связью. Для начала можно указать комплексы, составленные из простейших молекул (HF, HCl, H₂O, NH₃ и т.д.). Цель расчетов состоит в теоретическом предсказании изменений в спектрах молекул, образующих комплексы, и объяснений причин этих изменений. Эта информация нужна, в частности, при обнаружении таких комплексов.

9. Расчеты колебательных спектров поглощения различных пространственных изомеров

Булычев Валентин Петрович

Разные стереоизомеры молекул часто обладают различными физическими свойствами или отличаются биологическим воздействием (например, молекулы витаминов). Так как спектры разных изомеров молекул могут заметно отличаться, то присутствие того или иного изомера можно определить спектроскопически. В бакалаврской работе студенты могут теоретически определить различия в частотах и интенсивностях спектров изомеров, что важно при интерпретации экспериментальных данных. В качестве модельной системы для такого расчета можно указать *cis*- и *trans*-изомеры молекулы HONO, которая играет важную роль в балансе количества озона в верхних слоях атмосферы Земли.

10. Природа взаимодействия молекул

Бутурлимова Марина Валерьевна

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. Колебательный спектр линейных молекул

Меликова Сона Меджидовна

Задачей работы является расчет колебательных частот и форм нормальных колебаний линейной трехатомной молекулы, в частности симметричной молекулы CO₂ и ее изотопных модификаций. Решение этой задачи важно для дальнейшего изучения молекулярной спектроскопии и имеет приложение в физике атмосферы и физике лазеров.

12. Инфракрасные спектры воды

Меликова Сона Меджидовна

Задачей работы является получение инфракрасных спектров нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) двух изотопных модификаций воды (H₂O и D₂O). 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.

13. Моделирование структуры аргона, используя методы компьютерного моделирования

Тогадзе Ирина Константиновна iktren1@yandex.ru

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.