

Universitatea "Babeş-Bolyai" Cluj-Napoca
Facultatea de Fizică, Şcoala doctorală de Fizică
Anul universitar 2009-2010
Semestrul I

SYLLABUS

I. Informații generale despre curs și lucrări de laborator

Disciplina: Modele și metode teoretice în fizica atomică și nucleară
Anul de studii: I (sem. I)
Codul: FSD0002
Nr. de credite: 20
Nr. ore /săptămână: 2 curs + 1 seminar
Locul de desfășurare: sala 209
Programarea în orar: conform orarului

II. Informații despre titularul cursului

Nume: Onuc Cozar, Nagy Ladislau
Grad didactic: profesor
Titlu științific: doctor
E-mail: cozar@phys.ubbcluj.ro, lnagy@phys.ubbcluj.ro
Telefon, 405300 int. 5154
Ore de audiență: 1 ora / săptămână

III. Obiectivele disciplinei și competențe

Obiective:

Înșușirea unor noțiuni de bază privind teoria grupurilor, simetrie atomică, moleculară și nucleară cu aplicații în diferite modele structurale și de calcul utilizate pentru acestea. Înșușirea metodelor, modelelor și aproximațiilor care se folosesc în teoria împrăștiilor. Aplicarea acestora în investigarea atomilor, moleculelor și nucleelor prin impact cu particule încărcate și fotoni.

Componente:

Prin înșușirea acestor noțiuni doctoranzii vor fi capabili să înțeleagă și să asimileze mai ușor o serie de tehnici experimentale (IR, Raman, RES, RMN) utilizate în studiul structurii și dinamicii unor sisteme moleculare complexe de interes biomedical, poluanți organici și radioactivi etc.

Ei vor reuși de asemenea să cunoască și să aplice modelele clasice, semiclasice și cuantice în împrăștierea (elastică și inelastică) particulelor încărcate pe atomi și nuclee.

IV. Bibliografie:

1. O.Cozar, Teoria grupurilor în fizica atomului și moleculei, Ed.U.B.B., Cluj-Napoca, 1986
2. V.Chiș, O.Cozar, L.David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
3. Wu-Ki Tung, Group Theory in Physics, World Scientific, Philadelphia, 1985
4. G. Burns, Introduction to Group Theory with Applications, Academic Press, New York, 1977

5. D.S. Schlöndorff, Molecular Symmetry, An Introduction to Group Theory and its Uses in Chemistry, D. van Nostrand Company Ltd., London, 1965
6. A. Hernanz Gismero, Metodos teoricos de la chimica fisica, Vol.2, Universidad Nacional de Educacion a Distancia, Madrid, 1991
7. Bransden și Joachain, Fizica atomului și a moleculei, Editura Tehnică, București, 1998
8. Taylor, Scattering theory, Dover Publications, Mineola, New York, 2006
9. R. G. Newton, Scattering Theory Of Waves And Particles: Second Edition, Dover Publications, Mineola, New York, 2007
10. M.R.C. McDowell and J.P. Coleman, Introduction to the theory of ion-atom collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam-London, 1970
11. L. Nagy, Multi-electron processes in atomic collisions – Theory, Nucl. Instr. Meth B154 (1999) 123-130.

V. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

- a) la curs: prelegerea combinată utilizând tabla, mijloace vizuale, referate pe teme propuse, proiector multimedia.
- b) la seminar: efectuarea unor calcule concrete pe diferite cazuri reprezentative, analiza, discutarea și generalizarea rezultatelor obținute.

VI. Planificarea / Calendarul întâlnirilor și al verificărilor / examinărilor intermediare

VI. a. CURS

Nr. temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1.	Noțiuni privind teoria grupurilor cu aplicații în fizica atomică și nucleară. Grupuri, subgrupuri, clase, produsul direct al două grupuri.	2	[1]: 1-11 [2]: 4-12 [5]: 4-31
2.	Simetrie moleculară și grupuri de simetrie punctuală. Elemente și operații de simetrie, grupuri de simetrie scăzută, intermediară și înaltă.	2	[1]: 14-47 [2]: 15-56
3.	Reprezentările grupurilor, tipuri de reprezentări (reductibile, ireductibile), tabele de caractere, reducerea reprezentărilor reductibile, operatori de proiecție	2	[1]: 49-106 [2]: 72-127 [5]: 75-113
4.	Funcțiile de undă atomice și moleculare baza ale reprezentărilor ireductibile. Stabilirea integralelor nule. Despicarea nivelelor atomice într-o simetrie dată.	2	[2]: 194-246 [5]: 117-134
5.	Utilizarea proprietăților de simetrie în calculul orbitalilor moleculari. Orbitali hibridi. Aproximația π . Metoda LCAO-MO în cazul complexilor metalici.	2	[2]: 257-327 [5]: 181-228
6.	Vibrații moleculare. Coordonate interne și simetrizate, reguli de selecție pentru spectroscopia IR și Raman, calculul frecvențelor de vibrație.	2	[2]: 340-383 [5]: 138-174
7.	Grupurile SO(2) și SO(3), algebra Lie, proprietățile matricilor de rotație, grupurile Euclidiene bi- și tri-dimensionale, aplicații.	2	[3]: 80-117; 152-172 [4]: 341-364
8.	Importanța studiului împrăștiilor în determinarea structurii atomilor și a nucleelor. Modele teoretice pentru tratarea ciocnirilor. Noțiunea de secțiune eficace.	2	[7]: 529-537, 648-666

9.	Tratarea clasică a împrăstierii elastice. Determinarea traiectoriei și a unghiului de împrăștiere. Problema inversă.	2	[10]: 1-46
10.	Tratarea semiclassicală a tranzițiilor electronice. Metoda parametrului de impact. Limite de aplicabilitate.	2	[10]: 108-117
11.	Teoria cuantică a împrăstierii elastice. Tratarea staționară și dependentă de timp. Matricea de împrăștiere și matricea T.	2	[8]: 21-52,128-142
12.	Tratarea inelastică a împrăstierilor inelastice. Ecuațiile Lippman-Schwinger.	2	[8]: 315-362
13.	Seria Born. Aproximația Born. Aproximația undelor distorsionate.	2	[7]: 558-567 [8]: 143-163, 364-371
14.	Metoda canalelor cuplate. Aplicații.	2	[8]: 372-383 [10]: 118-129

VI. b. SEMINAR

Nr. temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1.	Analiza proprietăților unor grupuri. Clase, izomorfism. Determinarea elementelor, operațiilor de simetrie și grupurile punctuale în cazul unor molecule.	2	[1]: 12-13; 48 [2]: 14, 62-66
2.	Descompunerea în reprezentări ireductibile. Schimbări de baze. Operatori de proiecție, baze simetrizate. Despicierea nivelelor și termenilor atomici într-o simetrie dată.	2	[1]: 107-111 [2]: 128-141; 251-256
3.	Calculul orbitalilor hibridi și moleculari pentru diferite molecule, utilizând proprietățile de simetrie.	2	[1]: 184-250 [2]: 278-288; 328-339
4.	Analiza în coordonate normale a diferitelor molecule. Calculul frecvențelor de vibrație pentru aceste molecule.	2	[2]: 367-404
5.	Tratarea tranzițiilor multielectronice în atomi.	2	
6.	Aplicații ale metodei undelor distorsionate (DWBA) în cazul ionizării.	2	
7.	Teme actuale în fizica ciocnirilor atomice (interacțiuni cu câmp laser intens, ciocniri în plasma de temperatură înaltă, experimente cinematic complexe, efecte de interferență electronică etc.)	2	

VII. Modul de evaluare

- 20% evaluare pe parcurs (teste grilă);
- 20% activitate seminar;
- 20% întocmirea unor referate pe o tematică dată;
- 40% examen de sfârșit de semestru.

Data,
9.07.2008

Semnătura titularului,