

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.05 Колебательная спектроскопия

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

16.04.01 Техническая физика

Направленность (профиль)

16.04.01.02 Оптическая физика и квантовая электроника

Форма обучения

очная

Год набора

2021

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

д-р физ.-мат. наук, Зав.кафедрой , Александр Николаевич Втюрин

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Цель преподавания дисциплины – освоение и систематизация знаний по колебательной спектроскопии молекул и кристаллов, формирование комплексного представления о современных теоретических и экспериментальных методах исследования в этой области науки и различных ее практических приложениях.

1.2 Задачи изучения дисциплины

В результате изучения дисциплины магистрант должен приобрести знания, умения и навыки, необходимые для его профессиональной деятельности, в частности:

– сформировать представления об особенностях колебательных спектров конденсированных сред, как качественного перехода от спектров атомов к спектрам простых молекул, от спектров простых молекул к спектрам сложных молекул и комплексных ионов, от спектров молекул к спектрам кристаллов;

– изучить теоретические концепции и модели современной колебательной спектроскопии, описывающие взаимодействие электромагнитного излучения с веществом в явлениях поглощения и рассеяния;

– развить способности использования средств и методов колебательной спектроскопии как в научной, так и практической деятельности

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Запланированные результаты обучения по дисциплине |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ПК-1: Способен критически анализировать современные проблемы технической физики, ставить задачи и разрабатывать программу исследования, выбирать адекватные способы и методы решения экспериментальных и теоретических задач, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты | |
| ИД-1: Знает основы оптической физики и квантовой электроники | Знать основы физической и прикладной оптики и спектроскопии, основные принципы построения спектральных приборов Знать основные достижения и проблемы современной спектральной техники Знать основные типы, принципы построения и и характеристики спектральных систем |

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ИД-2: Умеет анализировать состояние и перспективы развития оптотехники | Уметь составлять план поиска научно-технической информации по разработке оптических и спектральных приборов и комплексов Уметь проводить поиск и анализ научно-технической информации Уметь проводить анализ отечественного и |
| | зарубежного опыта по разработке оптических и спектральных приборов и комплексов |
| ИД-3: Владеет навыками работы с научно-технической информацией | Владеть навыками работы с научно-технической информацией Владеть навыками патентного поиска. Владеть навыками работы с техническими текстами |
| ПК-2: Способен самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для оптимизации параметров объектов и процессов с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств | |
| ИД-1: Знает основные типы, характеристики оптических и оптико-электронных систем, элементную базу оптотехники | Знать основы физической и прикладной оптики и спектроскопии Знать физические основы, принципы построения и характеристики спектральных приборов и систем Знать принципы построения физических и математических моделей колебательных систем, основы их алгоритмизации и программирования |
| ИД-2: Умеет применять теоретические, практические и метрологические основы оптических измерений | Уметь формулировать задачу и определять набор параметров, с учетом которых должно быть проведено моделирование колебательных процессов с учетом особенностей работы спектральной аппаратуры Уметь проводить подбор оборудования и комплектующих, необходимых для проведения спектральных исследований. Уметь использовать стандартные компьютерные программы для проведения расчетов и математического моделирования колебательных спектров на основе физических процессов и явлений. |
| ИД-3: Владеет методами обработки экспериментальных данных | Владеть навыками выявления зависимости между параметрами анализируемого спектра и особенностями работы прибора Анализировать и применять результаты моделирования для интерпретации спектра Проводить спектральный эксперимент и обработку данных |

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: .

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

| Вид учебной работы | Всего, зачетных единиц (акад.час) | е |
|--------------------------------------------|--------------------------------------------|---|
| | | 1 |
| Контактная работа с преподавателем: | 1,33 (48) | |
| занятия лекционного типа | 0,89 (32) | |
| практические занятия | 0,44 (16) | |
| Самостоятельная работа обучающихся: | 1,67 (60) | |
| курсовое проектирование (КП) | Нет | |
| курсовая работа (КР) | Нет | |
| Промежуточная аттестация (Экзамен) | 1 (36) | |

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

| | | Контактная работа, ак. час. | | | | | | | |
|-----------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|--------------------------|-------------------------------------------|--------------------------|--------------------------------------------|--------------------------|-------------------------------------|--------------------------|
| № п/п | Модули, темы (разделы) дисциплины | Занятия лекционного типа | | Занятия семинарского типа | | | | Самостоятельная работа, ак. час. | |
| | | | | Семинары и/или Практические занятия | | Лабораторные работы и/или Практикумы | | | |
| | | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС |
| 1. Колебательная спектроскопия молекул | | | | | | | | | |
| | 1. Спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света | 4 | | | | | | | |
| | 2. Симметрия нормальных колебаний, понятие правил отбора | 4 | | | | | | | |
| | 3. Динамика молекул | 4 | | | | | | | |
| | 4. Характеристические частоты связей, отнесение частот колебательных спектров | 4 | | | | | | | |
| | 5. Интенсивность и поляризация линий спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света | 4 | | | | | | | |
| | 6. Расчет колебаний двухатомной молекулы. Понятия нормальных ко-лебаний и нормальных координат. Расчет колебаний линейной и изогнутой трехатомной молекулы | | | 2 | | | | | |

| | | | | | | | | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|--|---|--|--|--|----|--|
| 7. Расчет колебаний симметричных и асимметричных трехатомных молекул. Внутренние координаты колебаний. Симметрия нормальных колебаний, понятие правил отбора. Правила отбора для спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света, правило альтернативного запрета | | | 2 | | | | | |
| 8. Построение динамической матрицы для симметричных и асимметричных молекулы. Виды модельных атом-атомных потенциалов | | | 2 | | | | | |
| 9. Расчет колебательных спектров молекул с изотопным замещением | | | 2 | | | | | |
| 10. Правила отбора для спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света двух-, трех- и пятиатомных молекул | | | 2 | | | | | |
| 11. | | | | | | | 30 | |
| 2. Колебательная спектроскопия твердых тел | | | | | | | | |
| 1. Динамика кристаллических решеток | 4 | | | | | | | |
| 2. Симметричный анализ колебательных спектров кристаллов | 4 | | | | | | | |
| 3. Поляризация линий в колебательных спектрах монокристаллов | 4 | | | | | | | |
| 4. Точечные и пространственные группы симметрии кристаллических решеток, понятия обратной решетки, решетки Браве | | | 2 | | | | | |
| 5. Симметричный анализ колебательных спектров кристаллов. Правила отбора для колебательных спектров кристаллов типа алмаза, графита, NaCl, ZnS | | | 2 | | | | | |

| | | | | | | | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|--|----|--|--|--|----|--|
| 6. Корреляционный метод анализа колебательных спектров кристаллов. Правила отбора для колебательных спектров кристаллов типа CaCO ₃ , K ₂ SO ₄ , BaTiO ₃ | | | 2 | | | | | |
| 7. | | | | | | | 30 | |
| Всего | 32 | | 16 | | | | 60 | |

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Жижин Г. Н., Маврин Б. Н., Шабанов В. Ф. Оптические колебательные спектры кристаллов: монография(Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы [Физматлит]).
2. Пентин Ю. А., Курамшина Г. М. Основы молекулярной спектроскопии: учеб. пособие для студентов вузов(Москва: Мир).
3. Ельяшевич М. А., Грибов Л. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Ч. 1. Общие вопросы спектроскопии: [в 3-х ч.](Москва: URSS).
4. Литвин Ф. Ф., Дубровский В. Т., Хатыпов Р. А., Неверов К. В., Литвин Ф. Ф. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие(Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М").
5. Флайгер У. Х., Ельяшевич М. А. Строение и динамика молекул: Том 1: в 2-х томах : перевод с английского(Москва: Мир).
6. Пуле А., Матъе Ж.-П., Жижин Г. Н. Колебательные спектры и симметрия кристаллов: монография(Москва: Мир).
7. Барнс А., Орвилл-Томас У., Алексанян В. Т., Алиев М. Р., Бобров А. В., Кимельфельд Я. М. Колебательная спектроскопия: современные воззрения, тенденции развития(Москва: Мир).
8. Банкер Ф. Р., Алиев М. Р. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия: перевод с английского(Москва: Мир).
9. Андерсон А., Петров К. И. Применение спектров комбинационного рассеяния: перевод с английского(Москва: Мир).
10. Ботвич А. Н., Подопрigора В. Г., Шабанов В. Ф., Коршунов А. В. Комбинационное рассеяние света в молекулярных кристаллах: монография(Новосибирск: Наука. Сибирское отделение [СО]).
11. Луков В.В., Щербаков И.Н. Физические методы исследования в химии: Учебное пособие(Рн/Д: ФГАОУ ВПО "Южный федеральный университет").

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Microsoft Office.
2. Специализированные программы LabSpec 6, YASARA, Lady для обработки и численного моделирования колебательных спектров молекул и кристаллов

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. База данных Web of Science [Электронный ресурс]: www.isiknowledge.com,
2. Научная электронная библиотека [Электронный ресурс]: <http://elibrary.ru>

3. Базы данных спектральных характеристик органических веществ [Электронный ресурс]: <http://omlc.org>
4. Базы данных неорганических соединений и минералов:
5. solsa.crystallography.net/rod/search.html,
6. <http://www.irug.org/resources/spectral-databases-for-raman>
7. <http://rruff.info/>
8. on line ресурс моделирования структур кристаллов и их колебательных спектров: <http://www.cryst.ehu.es/>

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лекционные занятия проводятся в учебных аудиториях, укомплектованных специализированной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Практические занятия проводятся в компьютерном классе, укомплектованных специализированной мебелью, техническими средствами обучения, сетью компьютеров с выходом в Интернет и предустановленным специализированным программным обеспечением.