

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

2022

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
<b>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</b>	
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
<b>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</b>	
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
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,33 (48)</b>	
занятия лекционного типа	0,89 (32)	
практические занятия	0,44 (16)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>1,67 (60)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	
<b>Промежуточная аттестация (Экзамен)</b>	<b>1 (36)</b>	

### 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
<b>1. Колебательная спектроскопия молекул</b>									
	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 комби-национного рассеяния света двух-, трех- и пятиатомных молекул			2					
11.							30	
<b>2. Колебательная спектроскопия твердых тел</b>								
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 <sub>3</sub> , K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> , BaTiO <sub>3</sub>			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., Подопригора 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](http://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](http://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.