

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра химической и биологической физики**



Согласовано, декан ФФ

Блинов В.Е.

2025 г.

Рабочая программа дисциплины

СОВРЕМЕННАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

правление подготовки: **03.04.01 Прикладные математика и физика**
направленность (профиль): **все профили**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)			
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем		
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет
1	2	3	4	5	6	7	8	9	11
1	108	32	16	16	20	18	2		4

Всего 108 часов / 3 зачетные единицы из них:
- контактная работа 70 часов

Компетенции ПК-2

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2025

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	3
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	3
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	4
5. Перечень учебной литературы.	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	7
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	7
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	8
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	8
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	9
Аннотация.....	11

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Современная молекулярная спектроскопия» - дать представление об основных понятиях, задачах и методах, которые используются во вращательной, колебательной и электронной спектроскопии на примере спектров (поглощения, испускания и комбинационного рассеяния) молекул в газообразном и жидким состоянии. В ходе изучения данной дисциплины магистранты должны получить и освоить информацию о возможностях и фактическом состоянии молекулярной спектроскопии

Материал лекционного курса увязывается с передовыми исследованиями всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов. Специально указываются темы, активно обсуждающиеся в текущей профессиональной научной литературе.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-2. Способен осуществлять научно-технические разработки при исследовании самостоятельных тем.	ПК-2.1. Проводит работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований.	Знать основные законы, описывающие молекулярные спектры поглощения, испускания и комбинационного рассеяния. Уметь использовать эти законы для исследования задач молекулярной физики и биофизики (описания структуры молекул и свойств жидкостей и газов). Владеть спектроскопическими методами определения структуры и свойств молекул.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современная молекулярная спектроскопия» реализуется для обучающихся по направлению подготовки **03.04.01 Прикладные математика и физика**. В результате прохождения курса у студентов физического факультета должно сформироваться представление о том, что проблемы получения, обработки и переработки информации как в физических экспериментах, так и в более широком контексте являются физическими проблемами, для решения которых необходимо владение базовыми принципами фундаментальной физики. В свою очередь курс «Современная молекулярная спектроскопия» является основой для изучения более специальных разделов спектроскопии, и ее применений в биофизике.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоемкость дисциплины – 3 з.е. (108 ч)
Форма промежуточной аттестации: 1 семестр – экзамен

Таблица 3.1

№	Вид деятельности	Семестр
		1
1	Лекции, ч	32
2	Практические занятия, ч	16
3	Лабораторные занятия, ч	16
4	Занятия в контактной форме, ч, из них	70
5	из них аудиторных занятий, ч	64
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	4
9	Самостоятельная работа, час.	38
10	Всего, ч	108

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Лекции (32 ч)

Таблица 4.1

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Тема 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Молекулярная спектроскопия, основные моменты экспериментальных техник, микроскопия. Типы молекулярного движения. Поглощение, испускание и рассеяние. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов, коэффициенты Эйнштейна. Время жизни возбужденных состояний. Интенсивность спектральных линий. Дипольное излучение. Магнито-дипольное и квадрупольное приближения. Силы осцилляторов. Интенсивности в спектрах поглощения, испускания и комбинационного рассеяния.	2
Тема 2. Форма спектральной линии. Естественная ширина уровней энергии и спектральных линий. Контуры спектральных линий и полос, лоренцевский контур. Однородное уширение линий в газе и жидкости. Неоднородное уширение линий в газе и жидкости. Внутридоплеровская спектроскопия.	3
Тема 3. Вращательная спектроскопия. Вращательные уровни энергии симметричных молекул для случаев сферического и симметричного волчков. Степени вырождения вращательных уровней симметричных молекул, эффект Штарка. Вращательные переходы в симметричных молекулах, правила отбора и интенсивность вращательных линий. Вращательные уровни и переходы в асимметричном волчке. Особенности правил отбора для вращательных переходов в асимметричном волчке. Влияние центробежного растяжения на вращательные спектры. Вращательные спектры комбинационного рассеяния. Влияние ядерного спина на вращательные спектры. Приложения вращательной спектроскопии.	4

Тема 4. Колебательная спектроскопия двухатомных молекул. Классическое и квантовое решение колебательной задачи, колебательные уровни энергии и волновые функции. Правила отбора. Ангармоничность колебаний. Реальный вид кривой потенциальной энергии, сходимость колебательных уровней. Графический способ определения энергии диссоциации молекулы. Обертоны и составные тоны. Колебательно-вращательные спектры поглощения, метод комбинационных разностей. Спектроскопия комбинационного рассеяния двухатомных молекул. Вращательная структура в спектрах комбинационного рассеяния.	3
Тема 5. Колебательная спектроскопия многоатомных молекул. Общая характеристика колебаний многоатомных молекул, естественные и нормальные координаты. Классическое и квантовомеханическое решение колебательной задачи. Классификация нормальных колебаний. Энергия колебательных уровней многоатомных молекул. Ангармонизм в колебаниях многоатомных молекул. Влияние вращения на колебательные спектры многоатомных молекул. Параллельные и перпендикулярные переходы в линейных многоатомных молекулах. Степень деполяризации линий комбинационного рассеяния, правила Плачека. Влияние поляризации света на колебательные спектры поглощения.	3
Тема 6. Интерпретация колебательных спектров. Применение теории групп для изучения колебательных спектров. Влияние симметрии молекулы на правила отбора в колебательных спектрах поглощения и комбинационного рассеяния. Резонанс Ферми. Характеристические частоты и область «отпечатков пальцев» в колебательных спектрах. Типы характеристичности молекулярных колебаний в спектрах поглощения и комбинационного рассеяния. Подход к анализу колебательных спектров. Общий вид колебательных спектров многоатомной молекулы, подходы для их интерпретации. Влияние водородных связей на колебательные спектры.	5
Тема 7. Электронная спектроскопия. Колебательная структура электронных спектров. Принцип Франка-Кондона. Вращательная структура электронных спектров, диаграммы Фортра. Особенности электронных спектров многоатомных молекул. Диссоциация и преддиссоциация.	2
Тема 8. Судьба электронных состояний. Виды люминесценции: природа и условия наблюдения. Законы люминесценции. Фосфоресценция, флуоресценция и замедленная флуоресценция. Механизмы тушения люминесценции. Теория резонансной миграции Фёрстера.	2
Тема 9. Экспериментальные техники спектроскопии комбинационного рассеяния. Нерезонансная спектроскопия комбинационного рассеяния. Спектры резонансного комбинационного рассеяния. Когерентная антостоксовая спектроскопия комбинационного рассеяния. Спектроскопия комбинационного рассеяния поверхностного усиления. (1 час)	1
Тема 10. Основные моменты абсорбционной спектроскопии. Основные элементы техники абсорбционной спектроскопии. Фурье-спектроскопия. Различие экспериментальных компонентов по спектральным областям.	1
Тема 11. Лазерная спектроскопия. Лазерная абсорбционная спектроскопия малых поглощений: оптоакустическая, оптотермальная и внутрирезонаторная спек-	4

троскопия. Лазерный магнитный резонанс. Методы лазерной спектроскопии возбуждения: лазерно-индуцированная флуоресценция, оптическая накачка и метод двойного резонанса, спектроскопия единичных молекул. Лазерная спектроскопия с временным разрешением. Приложения лазерной спектроскопии. Лазерное разделение изотопов. Фемтохимия.

Программа лабораторных занятий (16 часов)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
1. Поглощение, испускание и рассеяние. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов, коэффициенты Эйнштейна. Время жизни возбужденных состояний.	2
2. Вращательные уровни энергии симметричных молекул для случаев сферического и симметричного волчков. Степени вырождения вращательных уровней симметричных молекул. Особенности правил отбора для вращательных переходов в асимметричном волчке. Влияние центробежного растяжения на вращательные спектры. Вращательные спектры комбинационного рассеяния. Влияние ядерного спина на вращательные спектры.	2
3. Реальный вид кривой потенциальной энергии, сходимость колебательных уровней. Графический способ определения энергии диссоциации молекулы. Колебательно-вращательные спектры поглощения, метод комбинационных разностей. Вращательная структура в спектрах комбинационного рассеяния.	2
4. Влияние вращения на колебательные спектры многоатомных молекул. Правила Плачека для разной поляризации возбуждающего излучения.	1
5. Применение теории групп для изучения колебательных спектров.	3
6. Анализ колебательных спектров.	3
7. Принцип Франка-Кондона. Вращательная структура электронных спектров, диаграммы Фортра. Квантовый выход люминесценции. Теория резонансной миграции Фёрстера.	3

Программа лабораторных занятий (16 часов)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
1. Ознакомление с техникой Фурье-ИК-спектроскопии и Фурье-ИК-микроскопии. Пробоподготовка образцов для ИК исследований в жидкости, знакомство с оборудованием для приготовления и работы с таблетированными образцами.	4

2. Регистрация Фурье-ИК-спектров пропускания и нарушенного полного внутреннего отражения. Соотнесение наблюдаемых полос основным колебательным группам молекул, анализ влияния симметрии молекулы на вид ее ИК-спектра.	4
3. Исследование явления сольватохромии по регистрации спектров возбуждения флуоресценции растворов красителей	4
4. Исследование влияния свойств среды на время жизни флуоресценции с помощью метода время-коррелированного счета фотонов.	4

Самостоятельная работа студентов (38 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	12 часов
Выполнение домашних заданий	8 часов
Подготовка к экзамену	18 часов

5. Перечень учебной литературы.

1. Пыряева А.П. Основы молекулярной спектроскопии. – Новосибирск: НГУ, 2020., ISBN 978-5-4437-1132-4 (75 экз.)
2. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: общие вопросы спектроскопии. – М.: ЛИБРОКОМ, 2017. – 236 с. (10 экз.)
3. Наберухин Ю. И. Лекции по молекулярной спектроскопии. – Новосибирск: НГУ, 1973. (28 экз.)
4. Atkins P. Physical Chemistry. – New York: Oxford University Press, 2007., ISBN 5-03-003789-6, [Ч.]1: Равновесная термодинамика 2007494 с. : ил., табл. ISBN 5-03-003786-1 (1 экз.)
5. Демтрёдер В. Современная лазерная спектроскопия. – Долгопрудный: Интеллект, 2014. – 1071 с., ISBN 978-5-91559-114-0 (7 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

Пыряева А.П. Основы молекулярной спектроскопии. – Новосибирск: НГУ, 2020.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);

- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

1. База данных молекулярных микроволновых спектров Национального института стандартов и технологий США NIST: <https://www.nist.gov/pml/molecular-microwave-spectral-databases>.
2. База данных спектров (ЯМР-, ЭПР-, ИК-, КР- и масс-спектры) органических веществ Spectral Database for Organic Compounds SDBS https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi.
3. Спектральная база данных (ЯМР-, ИК-, КР-, УФ-вид и масс-спектры) <https://spectrabase.com/>.
4. База данных Национального института стандартов и технологий США NIST Chemistry Webbook: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
5. База данных констант двухатомных молекул и их факторов Франка-Кондона для переходов между основным и первым возбужденным состоянием: <https://rios.mp.fhi.mpg.de/index.php>.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Для контроля самостоятельной работы студентов используется функционал портала Google Classroom.

Дополнительное взаимодействие со студентами также осуществляется с помощью приложений Notion, Google Disk, Google Forms, Google Tables.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины Современная молекулярная спектроскопия используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;
3. Лаборатории;
4. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде: теоретические опросы, задачи для самостоятельного решения в конце прохождения блока тем, домашние задания для самостоятельного решения, практическая работа по анализу и интерпретации ИК-спектра. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Три промежуточные проверки знаний проводятся посредством письменной сдачи блока теоретических и практических задач (месячные задачи). При решении задач пользоваться источниками информации разрешается.

Оценка за работу в семестре учитывает активность студента на практических занятиях, оцениваемую преподавателем, оценки за три блока теоретических и практических задач, а также количество сданных задач из заданий для самостоятельного решения. За работу в семестре выставляется оценка “2” («неудовлетворительно») в случае, если не сданы три блока месячных задач и/или сдано менее 80% задач из заданий для самостоятельного решения.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция и ПК-2 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Современной молекулярной спектроскопии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из трёх вопросов. Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица 2) по результатам ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Итоговая оценка не может быть выше “3” («удовлетворительно»), если оценка за работу в семестре “2” («неудовлетворительно»).

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на три вопроса из билета, аргументированно ответить на дополнительные вопросы, знать подходы для решения типичных задач.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень усвоения компетенций) нужно ответить на три вопроса билета, необходимо ориентироваться в общих терминах курса, допускается несколько несущественных ошибок, допускается отсутствие ответов на дополнительные вопросы.

Для получения оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень усвоения компетенций) необходимо ответить на два вопроса билета, допускаются незначительные ошибки, допускается отсутствие ответов на дополнительные вопросы.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-2	ПК-2.1. Проводит работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований.	<p>Знать методы и способы постановки и решения задач с использованием микронтроллеров, принципы действия, функциональные и архитектурные возможности современных микронтроллеров общего назначения; аппаратные и программные средства разработки устройств на базе микронтроллеров общего назначения.</p> <p>Уметь самостоятельно ставить и решать конкретные физические и инженерные задачи для получения необходимых параметров при проектировании электронных приборов на основе микронтроллеров общего назначения.</p> <p>Владеть навыками разработки программ управления микронтроллерами общего назначения; навыками отладки и верификации разработанных программ и аппаратных решений.</p>	Теоретические опросы, выполнение месячных заданий, экзамен

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, – работа оформлена аккуратно, четкие рисунки и чертежи, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий. <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы. В ответах на вопросы преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 95% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, отсутствие затруднений в объяснении процессов и явлений, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. <p>При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p>	<i>Отлично</i>
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, – работа оформлена аккуратно, четкие рисунки и чертежи, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок. <p>«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. Отвечает на дополнительные вопросы. В ответах на вопросы преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 80% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явлений, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок. 	<i>Хорошо</i>
<p><u>Решение заданий:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – задание решено правильно, - работа оформлена неаккуратно – неосознанность и неосновательность выбранных методов анализа, 	<i>Удовлетворительно</i>

- нет осмыслинности в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации,

- корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок.

«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. При ответах на вопросы допускает ошибки.

Письменная контрольная (тестовая) работа:

- не менее 50% ответов должны быть правильными.

Экзамен:

- теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплен ссылками на научную литературу и источники,
- частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей,
- самостоятельность и осмыслинность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, в объяснении процессов и явлений, а также затруднений при формулировке собственных суждений,
- корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок,
- наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.

Решение заданий:

- задание решено неправильно,
- компилятивное, неосмыслинное, нелогичное и неаргументированное изложение материала,
- грубые ошибки в применении терминов и понятий,

«Сдать задачу» означает объяснение хода её решения и, при необходимости, ответы на дополнительные вопросы преподавателя, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины. На дополнительные вопросы не отвечает.

Письменная контрольная (тестовая) работа:

- присутствие многочисленных ошибок (более 70% ответов содержат ошибки).

Экзамен:

- фрагментарное и недостаточное представление теоретического и фактического материала, не подкрепленное ссылками на научную литературу и источники,
- непонимание причинно-следственных связей,
- отсутствие осмыслинности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала,
- грубые ошибки в применении терминов и понятий,
- отсутствие ответов на дополнительные вопросы.

*Неудовле-
творительно*

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

1. Молекула формальдегида CH_2O – плоская. Необходимо:

- определить полное количество колебаний и их симметрию;

- изобразить форму колебаний;

- определить, какие колебания активны в ИК-спектрах поглощения, а какие в спектрах комбинационного рассеяния;

- установить количество линий, наблюдаемых в ИК-спектрах поглощения и комбинационного рассеяния;
 - определить степень деполяризации колебаний, разрешенных в спектре комбинационного рассеяния, пояснить ответ.
- Для температуры 1000 °C рассчитать отношение количества молекул на возбужденном и основном колебательных уровнях, считая, что энергия возбужденного уровня на 1000 см ⁻¹ выше соответствующего основного уровня энергии. Колебательные уровни невырождены.
 - Вращательный спектр комбинационного рассеяния молекулы ¹⁹F₂ состоит из серии стоксовых линий разнесенных друг от друга на 3.53 см ⁻¹ и такой же серии антостоксовых линий. Определить длину связи молекулы.
 - Рассчитать во сколько раз отличаются частоты основных ν=1←0 переходов молекул ¹H³⁵Cl и ²D³⁷Cl, если считать, что их силовые константы одинаковы.
 - Считая, что колебательные волновые функции можно приблизить прямоугольными функциями ширинами W и W', центрированными на одной длине связи, найдите соответствующие факторы Франка-Кондона, когда центры совпадают, а W'<W.

Примерные вопросы на экзамен

- Молекулярная спектроскопия. Разделение электронного, колебательного и вращательного движения молекулы.
- Нормальные координаты и их классификация. Обертоны и составные тоны.
- Интенсивность спектральных линий. Спонтанное и вынужденное комбинационное рассеяние.
- Уровни вращательных энергий и правила отбора во вращательных спектрах симметричных волчков.
- Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул.
- Поляризация спектральных линий комбинационного рассеяния. Правила Плачека.
- Фосфоресценция, флуоресценция и замедленная флуоресценция.
- Квантово-механическое описание взаимодействия двух осцилляторов. Резонанс Ферми.
- Характеристические группировки и частоты. Общий подход к интерпретации колебательного спектра.
- Модель Лоренца уширения линий в газах. Корреляционная теория формы линий.
- Механизмы уширения спектральных линий в жидкостях. Неоднородное уширение линий в жидкости и газе.
- Спектроскопия водородной связи. Проявление водородной связи в частоте, интенсивности и ширине валентных полос OH-групп.
- Колебательная структура электронных переходов. Связь спектров люминесценции со спектрами поглощения. Закон Стокса и правило зеркальной симметрии Лёвшина.
- Экспериментальные методы спектроскопии комбинационного рассеяния. Спектроскопия резонансного комбинационного рассеяния.
- Механизмы тушения люминесценции. Формула Штерна-Фольмера.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС ВО, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Современная молекулярная спектроскопия»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного

Аннотация

**к рабочей программе дисциплины курса
 «Современная молекулярная спектроскопия»**
Направление: 03.04.01 Прикладные математика и физика
направленность (профиль): все профили

Программа курса «Современная молекулярная спектроскопия» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.01 Прикладные математика и физика**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой химической и биологической физики в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами первого курса магистратуры физического факультета в осеннем семестре.

Цель курса – дать представление об основных понятиях, задачах и методах, которые используются во вращательной, колебательной и электронной спектроскопии на примере спектров (поглощения, испускания и комбинационного рассеяния) молекул в газообразном и жидкоком состоянии. В ходе изучения данной дисциплины магистранты должны получить и освоить информацию о возможностях и фактическом состоянии молекулярной спектроскопии.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-2. Способен осуществлять научно-технические разработки при исследовании самостоятельных тем.	ПК-2.1. Проводит работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований.	Знать основные законы, описывающие молекулярные спектры поглощения, испускания и комбинационного рассеяния. Уметь использовать эти законы для исследования задач молекулярной физики и биофизики (описания структуры молекул и свойств жидкостей и газов). Владеть спектроскопическими методами определения структуры и свойств молекул.

Курс рассчитан на один семестр (1-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часа / **3** зачетные единицы.