

**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**



Рабочая программа дисциплины

СОВРЕМЕННАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

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	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	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, 2022

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.	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	4
5. Перечень учебной литературы.	8
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	8
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	8
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	9
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	9
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	10

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 жидком 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 использовать специализированные знания в области физики при постановке и решении задач в научно-исследовательской деятельности с помощью современной аппаратуры и информационно-телекоммуникационных технологий в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	ПК -2.1. Проводит научные изыскания в избранной области экспериментальных и/или теоретических физических исследований с помощью современной аппаратуры и информационно-телекоммуникационных технологий в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	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 03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная 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. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

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	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	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										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, лабораторные занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач для самостоятельного решения.

Промежуточная аттестация: экзамен

- лекционные занятия – 32 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- лабораторные занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа, не включая период сессии – 20 часов;
- промежуточная аттестация: самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации, консультации, экзамен – 24 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (лекционные занятия, практические занятия, лабораторные занятия, консультации, экзамен) составляет 70 часов.

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

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы, 108 академических часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах)	
			Всего	Аудиторные часы				Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8	
1	Введение в молекулярную спектроскопию. Интенсивность спектральных линий	1-2	4	2			2	
2	Форма спектральной линии	3	5	3			2	
3.	Вращательная спектроскопия	4	8	4	2		2	
4.	Колебательная спектроскопия двухатомных молекул	5	7	3	2		2	
5.	Колебательная спектроскопия многоатомных молекул	6	6	3	1		2	
6.	Интерпретация колебательных спектров	7	17	5	6	4	2	
7.	Электронная спектроскопия	8	9	2	1	4	2	
8.	Судьба электронных состояний	9	10	2	2	4	2	
9.	Экспериментальные техники спектроскопии комбинационного рассеяния	10	5	1	2		2	
10.	Основные моменты абсорбционной спектроскопии	11	5	1		4		
11.	Лазерная спектроскопия	12	4	2			2	
12.	Фотоэлектронная спектроскопия	13	4	4				

	Групповая консультация		2					2
13.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18					18
14.	Экзамен		4					4
Всего			108	32	16	16	20	24

Программа и основное содержание лекций (36 часов)

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 часа)

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 часа)

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 ассиметричном волчке. Особенности правил отбора для вращательных переходов в ассиметричном волчке. Влияние центробежного растяжения на вращательные спектры. Вращательные спектры комбинационного рассеяния. Влияние ядерного спина на вращательные спектры. Приложения вращательной спектроскопии. (4 часа)

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. Обертонные и составные тоны. Колебательно-вращательные спектры поглощения, метод комбинационных разностей. Спектроскопия комбинационного рассеяния двухатомных молекул. Вращательная структура в спектрах комбинационного рассеяния. (3 часа)

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 деполаризации линий комбинационного рассеяния, правила Плачека. Влияние поляризации света на колебательные спектры поглощения. (3 часа)

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 часов)

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 часа)

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 часа)

Тема 9. Экспериментальные техники спектроскопии комбинационного рассеяния. Нерезонансная спектроскопия комбинационного рассеяния. Спектры резонансного комбинационного рассеяния. Когерентная антистоксовая спектроскопия комбинационного рассеяния. Спектроскопия комбинационного рассеяния поверхностного усиления. (1 час)

Тема 10. Основные моменты абсорбционной спектроскопии. Основные элементы техники абсорбционной спектроскопии. Фурье-спектроскопия. Различие экспериментальных компонентов по спектральным областям. (1 час)

Тема 11. Лазерная спектроскопия. Лазерная абсорбционная спектроскопия малых поглощений: оптоакустическая, оптотермальная и внутрирезонаторная спектроскопия. 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. (4 часа)

Тема 12. Фотоэлектронная спектроскопия. Основные моменты фотоэлектронной спектроскопии. Основные компоненты экспериментальных техник. Ультрафиолетовые фотоэлектронные молекулярные спектры и их интерпретация на примере молекул азота и бензола. Рентгеновские фотоэлектронные спектры газов. Рентгеновская флуоресцентная спектроскопия. (4 часа)

Программа практических занятий (16 часов)

1. Поглощение, испускание и рассеяние. Вероятности спонтанных и вынужденных переходов, коэффициенты Эйнштейна. Время жизни возбужденных состояний. (2 часа)
2. Вращательные уровни энергии симметричных молекул для случаев сферического и симметричного волчка. 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 часа)
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 часа)
4. Влияние вращения на колебательные спектры многоатомных молекул. Правила Плачека для разной поляризации возбуждающего излучения. (1 час)
5. Применение теории групп для изучения колебательных спектров. (3 часа)
6. Анализ колебательных спектров. (3 часа)
7. Принцип Франка-Кондона. Вращательная структура электронных спектров, диаграммы Фортра. Квантовый выход люминесценции. Теория резонансной миграции Фёрстера. (3 часа)

Программа лабораторных занятий (16 часов)

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 часа).
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 часа).
3. Исследование явления сольватохромии по регистрации спектров возбуждения флуоресценции растворов красителей (4 часа).
4. Исследование влияния свойств среды на время жизни флуоресценции с помощью метода время-коррелированного счета фотонов. (4 часа).

Самостоятельная работа студентов (38 часа)

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/sdb/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

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК -2.1. Проводит научные изыскания в избранной области экспериментальных и/или теоретических физических исследований с помощью современной аппаратуры и информационно-телекоммуникационных технологий в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	<p>Знать методы и способы постановки и решения задач с использованием микроконтроллеров, принципы действия, функциональные и архитектурные возможности современных микроконтроллеров общего назначения; аппаратные и программные средства разработки устройств на базе микроконтроллеров общего назначения.</p> <p>Уметь самостоятельно ставить и решать конкретные физические и инженерные задачи для получения необходимых параметров при проектировании электронных приборов на основе микроконтроллеров общего назначения.</p> <p>Владеть навыками разработки программ управления микроконтроллерами общего назначения; навыками отладки и верификации разработанных программ и аппаратных решений.</p>	Теоретические опросы, выполнение месячных заданий, экзамен

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Современная молекулярная спектроскопия».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)

обучения					
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 2.1	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 2.1	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

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.

- 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 $1000\text{ }^\circ\text{C}$ 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 $^{19}\text{F}_2$ состоит из серии стоксовых линий разнесенных друг от друга на 3.53 см^{-1} и такой же серии антистоксовых линий. Определить длину связи молекулы.

4. Рассчитать во сколько раз отличаются частоты основных $\nu=1 \leftarrow 0$ переходов молекул ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ и ${}^2\text{D}^{37}\text{Cl}$, если считать, что их силовые константы одинаковы.
5. 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

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

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

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Современная молекулярная спектроскопия»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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