

**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 биомедицинской физики**



**Рабочая программа дисциплины**

**ОПТИЧЕСКАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

Направление подготовки **03.03.02 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	
5	72	32			18	18	2				2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы -контактная работа 36 часов											
Компетенции ПК-1											

Ответственный за образовательную программу,  
д.ф.-м.н., проф.

С.В.Цыбуля

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. ....	6
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.....	7
9 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине. ....	7
10 Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. ....	8

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

Курс «Оптическая молекулярная спектроскопия» предназначен для обучения студентов-физиков фундаментальным основам молекулярной спектроскопии, которая широко используется во всех областях биофизики

Основная цель освоения курса дать представление об основных понятиях, задачах и методах, которые используются в любых видах спектроскопии, – на примере оптических спектров (инфракрасного поглощения, комбинационного рассеяния и люминесценции) молекул в жидком состоянии. Студенты будут ознакомлены с основными эмпирическими фактами, вскрываемыми спектроскопией и их теоретическими объяснениями на основе квантовой механики и молекулярной физики. Эти специальные знания необходимы для освоения других физических курсов, читаемых на физическом факультете Новосибирского государственного университета (уровень бакалавриата) в блоке специальных дисциплин по выбору «Биофизика», подготовки квалификационной работы бакалавра.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<b>ПК-1</b> Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты. <b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области. <b>ПК 1.3</b> Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<b>Знать</b> основные законы, описывающие ИК и КР спектры и спектры люминесценции. <b>Уметь</b> использовать эти законы для исследования задач молекулярной физики и биофизики (описания структуры молекул и свойств жидкой среды). <b>Владеть</b> спектроскопическими методами определения структуры и свойств молекул.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс «Оптическая молекулярная спектроскопия» читается в осеннем семестре для студентов 3 курса, обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой биомедицинской физики. Для его восприятия требуется предварительная подготовка студентов по механике, электродинамике, а также по математике (векторный анализ, дифференциальное и интегральное исчисления). Курс должен предшествовать прохождению производственной практики (НИР) и выполнению квалификационной работы бакалавра, т.к. дает необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения биофизических исследований, необходимых для проведения экспериментальной работы, связанной с изучением структуры и функций биологических объектов.

**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
7	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы -контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: контрольные работы, устный опрос.

Промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

- лекции – 32 часа;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультации и экзамен)- 22 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (лекции, консультации, экзамен) составляет 36 часов.

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

Дисциплина «Оптическая молекулярная спектроскопия» читается на 3 курсе физического факультета НГУ в 5 семестре. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	Введение. Молекулярная спектроскопия.	1	4	2		2	

2	Колебательная спектроскопия. Инфракрасные спектры (ИК) поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР).	2-3	6	4		2	
3	Теория интенсивностей в ИК-спектрах.	4-6	8	6		2	
4	Правила отбора в колебательных спектрах.	7	4	2		2	
5	Характеристические группировки и частоты. Общая картина колебательного спектра молекул углеводов.	8	3	2		1	
6	Форма спектральных линий.	9-10	5	4		1	
7	Спектроскопия водородной связи.	11	4	2		2	
8	Электронная спектроскопия. Спектры поглощения и люминесценции. Основные законы люминесценции.	12-13	6	4		2	
9	Флуоресценция и фосфоресценция.	14	4	2		2	
10	Поляризация люминесценции.	15	3	2		1	
11	Процессы тушения люминесценции.	16	3	2		1	
12	Групповая консультация		2				2
13	Самостоятельная подготовка к экзамену		18				18
14	Экзамен.		2				2
	<b>Всего</b>		<b>72</b>		<b>32</b>	<b>18</b>	<b>22</b>

### Программа и основное содержание лекций (32 часа)

#### Раздел 1. Введение. Молекулярная спектроскопия (2 часа)

Общий обзор современной спектроскопии: от гамма-излучения до радиоволн. Молекулярная спектроскопия. Разделение электронного, колебательного и вращательного движения молекулы.

#### Раздел 2. Колебательная спектроскопия. Инфракрасные спектры (ИК) поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР) (4 часа)

Классическое и квантовое решение колебательной задачи. Нормальные координаты. Обертоны и составные тоны. Проявление колебательных переходов в инфракрасном (ИК) поглощении и комбинационном рассеянии (КР).

#### Раздел 3. Теория интенсивностей в ИК-спектрах (6 часов)

Теория интенсивностей. Интенсивность колебательных переходов в ИК и КР (по Эйнштейну). Спонтанное и вынужденное КР. Зависимость матричных элементов перехода от нормальных координат. Интенсивность поглощения и рассеяния всеми уровнями осциллятора. Безызлучательные переходы и колебательная релаксация; явление насыщения. Поглощение и рассеяние совокупности молекул: случай газов и жидкостей. Эмпирическая зависимость интенсивности от температуры и её возможные объяснения. Концепция внутреннего поля.

Степень деполяризации линий КР. Расчёт интенсивности и степени деполяризации для ансамбля хаотически ориентированных молекул.

#### Раздел 4. Правила отбора в колебательных спектрах (2 часа)

Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул. Полностью симметричные колебания. Правило альтернативного запрета. Правила Плачека для степени деполяризации линий КР.

#### Раздел 5. Характеристические группировки и частоты. Общая картина колебательного спектра молекул углеводов (2 часа)

Расчёт частот собственных колебаний молекулы. Естественные координаты. Вековое уравнение. Прямая и обратная спектральные задачи. Метод изотопного замещения. Метод парциальных осцилляторов. Квантово-механическое описание взаимодействия двух осцилляторов. Резонанс Ферми. Характеристические группировки и частоты. Общая картина колебательного спектра углеводородов.

#### **Раздел 6. Форма спектральных линий (4 часа)**

Модель Лоренца уширения линий в газах. Корреляционная теория формы линий. Функция корреляции случайного процесса с несущей частотой. Механизмы уширения спектральных линий в жидкостях. Марковский шум. Броуновское вращение как основной источник уширения. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение линий. Статистический контур. Доплеровское уширение. Провал Лэмба. Спектральная диффузия и сужение статистического контура при быстром обмене.

#### **Раздел 7. Спектроскопия водородной связи (2 часа)**

Проявление водородной связи в частоте, интенсивности и ширине валентных полос ОН-групп. Флуктуационная теории уширения полос Н-связи. Температурная трансформация формы контура.

#### **Раздел 8. Электронная спектроскопия. Спектры поглощения и люминесценции. Основные законы люминесценции (4 часа)**

Колебательная структура электронных переходов – вибронные спектры. Связь спектров люминесценции со спектрами поглощения. Закон Стокса и правило зеркальной симметрии Лёвшина. Внутренняя конверсия. Квантовый выход люминесценции. Закон Вавилова для квантового выхода. Спектр возбуждения (действия).

#### **Раздел 9. Флуоресценция и фосфоресценция (2 часа)**

Флуоресценция, фосфоресценция и замедленная флуоресценция: природа и условия наблюдения. Импульсный метод исследования триплет-триплетных переходов (флеш-фотолиз).

#### **Раздел 10. Поляризация люминесценции (2 часа)**

Формула Лёвшина-Перрена и её применение в биофизике и коллоидной химии.

#### **Раздел 11. Процессы тушения люминесценции (2 часа)**

Тепловое тушение. Тушение посторонней примесью. Формула Штерна-Фольмера. Контактный и дистанционный механизм тушения. Теория диффузионного тушения (с учётом нестационарности диффузии). Концентрационное тушение и миграция энергии. Теория резонансной миграции Фёрстера. Сенсibilизированная люминесценция. Триплет-триплетная миграция.

#### **Самостоятельная работа студентов (36 часов)**

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	14
Выполнение контрольных работ	4
Подготовка к экзамену	18

### **5. Перечень учебной литературы.**

#### **5.1. Основная литература**

1. Ю.И.Наберухин. Лекции по молекулярной спектроскопии. Новосибирск: НГУ, 1973. Электронный вариант: <http://ftp.kinetics.nsc.ru/chichinin/rbooks.htm/naberuhin.zip>.

#### **5.2. Дополнительная литература**

1. Грибов Л.А. Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976.

2. Сущинский М.М. Спектры комбинационного рассеяния молекул и кристаллов. М.: Наука, 1969.
3. Паркер С. Фотолюминесценция растворов. М.: Мир, 1972.
4. Лакович Д. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующим учебными материалами:

1. *Ю.И.Наберухин*. Лекции по молекулярной спектроскопии. Новосибирск: НГУ, 1973.  
Электронный вариант: <http://ftp.kinetics.nsc.ru/chichinin/rbooks.htm/naberuhin.zip>.
2. *Грибов Л.А.* Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976.
3. *Сущинский М.М.* Спектры комбинационного рассеяния молекул и кристаллов. М.: Наука, 1969.
4. *Паркер С.* Фотолюминесценция растворов. М.: Мир, 1972.
5. *Лакович Д.* Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.

#### **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.
- закрытая образовательная группа в социальной сети «VK».

##### **7.1 Современные профессиональные базы данных**

Не используются.

##### **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.

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

Для реализации дисциплины «Оптическая молекулярная спектроскопия» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

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 в ходе семестра путем опроса по результатам самостоятельной работы студентов (в том числе самостоятельного выполнения контрольных работ) и по материалам предыдущей лекции.

#### *Промежуточная аттестация*

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области методов физических измерений в биологии и медицине в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит во время экзамена. Экзамен проводится в конце семестра в устной форме. Студент получает два вопроса, которые подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Ответ 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
<b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	<b>Знать</b> основные законы, описывающие ИК и КР спектры и спектры люминесценции.	Проведение контрольных работ, экзамен.
<b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	<b>Уметь</b> использовать эти законы для исследования задач молекулярной физики и биофизики (описания структуры молекул и свойств жидкой среды).	Проведение контрольных работ, экзамен.
<b>ПК 1.3</b> Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<b>Владеть</b> спектроскопическими методами определения структуры и свойств молекул.	Проведение контрольных работ, экзамен.



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

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	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)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	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 1.2	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 1.3	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

### Типовые задания контрольной работы

1. Спектрофотометр оснащен ксеноновой 120 Вт лампой, 1 см кюветой и ФЭУ-140 для регистрации. Определить чувствительность определения концентрации флуоресцеина. Недостающие справочные величины подобрать по необходимости.
2. Флуориметр оснащен ксеноновой 120 Вт лампой, 1x1 см кюветой и ФЭУ-140 для регистрации. Определить чувствительность определения концентрации фикоэритрина. Недостающие справочные величины подобрать по необходимости.

### Вопросы для проведения экзамена

Вопросы по разделу «Колебательная спектроскопия».

1. Колебательная задача: а) классическое описание; б) квантовое описание.

2. Обертоны и составные тоны. Кратность и интенсивность.
3. Методы расчета интенсивностей колебательных переходов в ИК и КР (по Эйнштейну).
4. Зависимость матричных элементов перехода от нормальных координат.
5. Расчет интенсивности поглощения и рассеяния всеми уровнями осциллятора.
6. Эмпирическая зависимость интенсивности от температуры и её возможные объяснения.
7. Расчет интенсивности и степени деполяризации для ансамбля хаотически ориентированных молекул.
8. Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул.
9. Правила Плачека для степени деполяризации линий КР.
10. Расчет частот собственных колебаний молекулы.
11. Прямая и обратная спектральные задачи.
12. Квантово-механическое описание взаимодействия двух осцилляторов.
13. Резонанс Ферми.
14. Форма спектральных линий.
15. Модель Лоренца уширения линий в газах.
16. Механизмы уширения спектральных линий в жидкостях.
17. Доплеровское уширение.

- 
1. Связь спектров люминесценции со спектрами поглощения.
  2. Закон Стокса и правило зеркальной симметрии Лёвшина.
  3. Закон Вавилова для квантового выхода люминесценции.
  4. Формула Лёвшина-Перрена и её применение в биофизике и коллоидной химии.
  5. Формула Штерна-Фольмера.
  6. Теория резонансной миграции Фёрстера.
  7. Поляризация люминесценции.

### Пример экзаменационного билета

1. Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул.
2. Связь спектров люминесценции со спектрами поглощения.

**Форма экзаменационного билета представлена на рисунке.**

<p><i>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</i></p> <p><i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования</i></p> <p><i>«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»</i></p> <p><i>(Новосибирский государственный университет, НГУ)</i></p> <p><i>Физический факультет</i></p>	
<p><b>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</b></p>	
1. ....	
2. ....	
Составитель _____	/Ф.И.О. преподавателя/
	(подпись)
« _____ » _____	20 г.

**Лист актуализации рабочей программы  
по дисциплине «Оптическая молекулярная спектроскопия»  
по направлению подготовки 03.03.02 Физика  
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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