

**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 физических методов исследования твёрдого тела**



**Рабочая программа дисциплины**  
**КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ ИК И КР 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
6	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - 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. ....	4
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. ....	5
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. ....	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

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

Курс «**Колебательная ИК и КР спектроскопия**» предназначен для обучения студентов-физиков основам современных спектральных методов исследования кристаллов.

Основной целью освоения курса является ознакомление с: 1) теоретическим описанием комбинационного рассеяния и инфракрасного поглощения света кристаллами; 2) теорией колебаний молекул; 3) теорией колебаний кристаллов; 4) представлением о симметрии колебаний; 5) анализом колебаний молекул и кристаллов по симметрии; 6) правилами отбора в колебательных спектрах; 7) способами получения колебательных (ИК и КР) спектров; 8) описанием спектральных параметров колебательных мод (положения максимума, ширины и интенсивности; 9) ангармонизмом колебаний; 10) рассеянием света в стеклах и наночастицах; 11) проявлением в колебательных спектрах водородных связей и их свойствами; 12) рассеянием света на колебаниях молекул в полостях кристаллов; 13) рассеянием света в молекулярных кристаллах.

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	<p><b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p><b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p><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</p>	<p><b>Знать</b> основы теории возникновения ИК поглощения и комбинационного рассеяния света в кристаллах; основы методик обработки данных и работы с современными базами структурных данных, основы анализа колебательных спектров и определения основных структурных и физических свойств соединений.</p> <p><b>Уметь</b> использовать данные колебательной спектроскопии при анализе строения кристаллических объектов в комплексе с другими физико-химическими методами исследования структуры кристаллов; получать колебательный спектр моно- и поликристаллических образцов, а также проводить корректную обработку полученных спектральных данных.</p> <p><b>Владеть</b> навыками применения основных экспериментальных методик колебательной спектроскопии в приложении к исследованию структуры кристаллов; программными комплексами для обработки спектральных данных, базами кристаллохимических данных.</p>

Курс «Колебательная ИК и КР спектроскопия» читается классическим способом – проводятся лекции и практические занятия с постановкой промежуточных вопросов. Все практические заня-

тия проводятся в интерактивной форме. Обсуждаются способы решения поставленных задач, оптимальность предложенных решений. Поощряется элемент соревновательности. Существенным элементом образовательных технологий является не только умение студента найти решение задачи, но и способность доходчиво донести его до всей аудитории. Умение ответить на вопросы сокурсников и преподавателя развивает навыки, которые будут необходимы в дальнейшей профессиональной деятельности студента.

Всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов, материал лекционного курса увязывается с современными исследованиями в передовых отечественных и в мировых ускорительных центрах. Специально указываются темы, активно обсуждающиеся в текущей профессиональной научной литературе и планах дальнейших работ в институтах, в которых студенты проходят научную практику.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Курс «**Колебательная ИК и КР спектроскопия**» читается в весеннем семестре 3 курса для бакалавров, обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Для его восприятия требуется предварительная подготовка студентов электродинамике, кристаллографии, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисления, численные методы решения систем линейных уравнений и др.). Он должен предшествовать прохождению производственной практики (НИР) и выполнению квалификационной работы бакалавра, т.к. дает необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения исследований структуры и свойств твердого тела с помощью методов колебательной спектроскопии.

## 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.

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
6	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

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, консультации, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: контрольные вопросы по лекционным и практическим занятиям;
- промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
  - практические занятия – 16 часов;
  - самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
  - промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультации и экзамен) – 22 часа.
- Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

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

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

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Теория неупругого рассеяния света.	1	3	2		1	
2	Теория колебаний молекул.	2	3	1	1	1	
3	Теория колебаний кристаллов.	3	3	1	1	1	
4	Контрольные вопросы по темам 1-3.	4	4		2	2	
5.	Симметрия колебаний.	5	3	2		1	
6.	Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии.	6	3	1	1	1	
7.	Раман-тензор и правила отбора в колебательных спектрах	7	3	1	1	1	
8.	Контрольные вопросы по лекциям 5-7.	8	4		2	2	
9.	Техника спектроскопии КР.	9	3	2		1	
10.	Частота, ширина и интенсивность линий в колебательных спектрах.	10	3	1	1	1	
11.	Амплитуда и ангармонизм колебаний.	11	3	1	1	1	
12.	Рассеяние света в стеклах и наночастицах.	12	3	1	1	1	
13.	Водородная связь.	13	3	1	1	1	
14.	Колебания молекул H <sub>2</sub> O в полостях кристаллов.	14	3	1	1	1	
15.	Колебания молекулярных кристаллов.	15	3	1	1	1	
16.	Контрольные вопросы по лекциям. Отчеты по практическим занятиям.	16	3		2	1	
17.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18
18.	Консультации перед экзаменом		2				2
19.	Экзамен		2				2
<b>Всего</b>			<b>72</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>18</b>	<b>22</b>

## Программа и основное содержание лекций (16 часов)

- 1. Теория рассеяния света.** Упругое и неупругое рассеяние света. Элементарная теория рассеяния на колебаниях. Полуклассический и квантово-механический подходы. (1 час)
- 2. Колебания молекул.** Гармонический осциллятор в классической механике. Квантово-механический гармонический осциллятор. Амплитуда колебаний. Вращательные состояния двухатомных молекул. Колебания многоатомных молекул. Вековое уравнение. (1 час)
- 3. Колебания кристаллов.** Типы фононов в кристаллах. Дисперсия фононов. Зоны Бриллюэна. Плотность фононных состояний. Правила отбора по волновому вектору. Эффекты взаимодействия в полярных кристаллах. (1 час)
- 4. Симметрия колебаний.** Симметрия колебаний молекул, координаты симметрии и эквивалентные координаты. Матрицы преобразования колебательных координат. Вырожденные и невырожденные колебания. Группы симметрии молекул и кристаллов. Неприводимые представления. Симметрия колебаний кристаллов. (1 час)
- 5. Анализ колебаний молекул по симметрии.** Физические основы анализа колебаний молекул. Анализ колебаний на примере тетраэдрической молекулы. (1 час)
- 6. Анализ колебаний кристаллов по симметрии.** Физические основы анализа колебаний кристаллов. Анализ колебаний на примере кристаллов кремния, граната, графита. Число колебаний. (1 час)
- 7. Раман-тензор и правила отбора в колебательных спектрах.** Тензор поляризуемости и раман-тензор. Физические причины возникновения правил отбора. Правила отбора для процессов второго порядка. (1 час)
- 8. Техника КР-спектроскопии.** Блок-схема КР-спектрометра. Типы спектральных устройств для КР-спектроскопии. Поляризационные измерения. «Утечка» поляризации. (1 час)
- 9. Физические и технические особенности ИК- и КР-спектроскопии.** Физические разновидности рамановского рассеяния. Единицы измерения. (1 час)
- 10. Частота колебаний.** Физическая и химическая характеристика частоты колебаний. Распространенные примеры. Характеристические колебания. Кристаллические эффекты. Модовое поведение. Взаимодействие колебаний. (1 час)
- 11. Ширина и интенсивность линий в колебательных спектрах.** Ширина спектральной линии. Интенсивность линий в спектрах КР на примере колебательного спектра кристалла циркона. Поляризация линий в спектрах КР. (1 час)
- 12. Амплитуда и ангармонизм колебаний.** Амплитуда колебаний. Ангармонизм колебаний. Зависимость частот колебаний от температуры. Ангармонические вклады. Ангармоническое взаимодействие нормальных колебаний. Изотопозамещение. Нулевые колебания. (1 час)
- 13. Рассеяние света в стеклах и наночастицах.** Фононный спектр в дефектных кристаллах. «Складывание» зон. Бозонный пик. Локализация фононов в наночастицах. Моделирование спектра рассеяния на наночастицах кремния. (1 час)
- 14. Водородная связь.** Определение водородной связи и основные свойства. Водородная связь O-H...O. Водородная связь N-H...O. слабые C-H...Y связи. «Синий» сдвиг. Физические аспекты особенностей водородных связей. (1 час)
- 15. Колебания молекул H<sub>2</sub>O в полостях кристаллов.** Колебания молекулы H<sub>2</sub>O в полостях берилла и других минералов. H<sub>2</sub>O, тип I. H<sub>2</sub>O, тип II. H<sub>2</sub>O в полостях других минералов. (1 час)

**16. Колебания молекулярных кристаллов.** Общие замечания. Методические особенности. Спектры кристаллов аминокислот. «Аномальные» изменения интенсивностей низкочастотных мод в L-аланине. Особенности водородной связи в кристаллах бензойной кислоты при низкой температуре. **(1 час)**

**Программа практических занятий (16 часов)**

*Занятие 1.* Регистрация спектра ИК-поглощения.

1. Знакомство с устройством Фурье-спектрометра (Bruker, Vertex 80): общая схема прибора, порядок включения, меры безопасности.
2. Ознакомление с методикой приготовления образцов для регистрации ИК-спектров.
3. Приготовление образца твердого соединения и получение ИК-спектра. **(2 часа)**

*Занятие 2.* Регистрация спектра ИК-поглощения.

1. Приготовление образца жидкого соединения и получение ИК-спектра
2. Обработка результатов измерений.
3. Ознакомление с программным обеспечением для обработки ИК-спектров. **(2 часа)**

*Занятие 3.* Регистрация спектра КР кристаллов.

1. Знакомство с устройством КР-спектрометра (LabRAM HR Evolution): общая схема прибора, порядок включения, меры безопасности.
2. Ознакомление с техникой регистрации спектров КР.
3. Калибровка спектров КР по длине волны. **(2 часа)**

*Занятие 4.* Регистрация спектра КР кристаллов.

1. Техника измерений спектров на различных дифракционных решетках.
2. Техника регистрации спектров в широкой спектральной области.
3. Регистрация спектров КР различных соединений: кристаллов, порошков, жидкостей. **(3 часа)**

*Занятие 5.* Поляризационные измерения в спектроскопии КР кристаллов.

1. Ознакомление с приемами ориентации кристаллов. Нахождение кристаллографических осей.
2. Получение поляризованных спектров ориентированных кристаллов кремния, граната (пиропа). **(2 часа)**

*Занятие 6.* Ознакомление с программным обеспечением для обработки КР-спектров

1. Обработка спектров, сглаживание шума, вычитание фона.
2. Перенос спектров в Программу “Origin” и работа со спектрами в этой программе. **(2 часа)**

*Занятие 7.* Техника регистрации спектров КР при различных температурах

1. Знакомство с устройством гелиевого криостата замкнутого цикла.
2. Приготовление образца для низкотемпературных измерений.
3. Получение поляризованных спектров ориентированных кристаллов при низкой температуре. **(3 часа)**

**Самостоятельная работа студентов (36 часов)**

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	6
Подготовка к контрольным работам	6
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	6
Подготовка к экзамену	18

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

1. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия, «Эдиториал УРСС», Москва, 2007., ISBN 978-5-484-00886-5 (10 экз.)
2. Б.А. Колесов. Раман-спектроскопия в неорганической химии и минералогии, Новосибирск, издательство СО РАН, 2009., ISBN 978-5-7692-1070-9 (2 экз.)
3. Г.Н. Жижин, Б.Н. Маврин, В.Ф. Шабанов, Оптические колебательные спектры кристаллов, «Наука», Москва, 1984.(2 экз.)

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

4. Б.А. Колесов. Раман-спектроскопия в неорганической химии и минералогии, Новосибирск, издательство СО РАН, 2009.

## **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**

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.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

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

Для реализации дисциплины 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 ответов на контрольные вопросы по лекционным и практическим занятиям.

#### ***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 колебательной ИК и КР 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. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

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**

<b>Индикатор</b>	<b>Результат обучения по дисциплине</b>	<b>Оценочные средства</b>
------------------	---	---------------------------

<p><b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p>	<p><b>Знать</b> основы теории возникновения ИК поглощения и комбинационного рассеяния света в кристаллах; основы методик обработки данных и работы с современными базами структурных данных, основы анализа колебательных спектров и определения основных структурных и физических свойств соединений.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>
<p><b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области</p>	<p><b>Уметь</b> использовать данные колебательной спектроскопии при анализе строения кристаллических объектов в комплексе с другими физико-химическими методами исследования структуры кристаллов; получать колебательный спектр моно- и поликристаллических образцов, а также проводить корректную обработку полученных спектральных данных.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>
<p><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</p>	<p><b>Владеть</b> навыками применения основных экспериментальных методик колебательной спектроскопии в приложении к исследованию структуры кристаллов; программными комплексами для обработки спектральных данных, базами кристаллохимических данных.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>

**10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Колебательная ИК и КР 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

#### Примеры контрольных вопросов

1. Физический процесс и основные положения теории рамановского рассеяния.
2. Классический и квантово-механический гармонический осциллятор. Амплитуда колебаний.
3. Колебания многоатомных молекул. Вековое уравнение.
4. Фононы в кристаллах. Дисперсия фононов.
5. Эффекты взаимодействия в полярных кристаллах.
6. Симметрия колебаний молекул. Координаты симметрии и эквивалентные координаты.
7. Неприводимые представления. Характеры неприводимых представлений.
8. Симметрия колебаний кристаллов.
9. Анализ колебаний молекул по симметрии.
10. Схема (основные ступени) анализа колебаний кристаллов по симметрии.
11. Тензор поляризуемости и раман-тензор. Пример составления раман-тензоров для колебаний различных типов симметрии молекул  $H_2O$ .
12. Блок-схема рамановского спектрометра и основные ее элементы.
13. Основные задачи и техника поляризационных измерений.
14. Частота колебаний. Зависимость от температуры.
15. Интенсивность колебаний. Зависимость от температуры.
16. Ширина спектральных линий. Зависимость от температуры.

17. Рассеяние света в стеклах и наночастицах. Основные положения.
18. Ангармоничность колебаний. Основные положения и следствия.
19. Колебания различных форм углерода – графита, нанотрубок, графена.

### **Примерные вопросы на экзамен**

#### **Тема №1 «Теория неупругого рассеяния света»**

- 1.1. Значение колебательной спектроскопии в исследовании химических соединений.
- 1.2. Процесс возникновения спектров ИК и КР.
- 1.3. Стоксово и антистоксово рассеяние.
- 1.4. Элементарная теория рассеяния.
- 1.5. Полуклассическая и квантовая теории рассеяния.
- 1.6. Сравнение элементарной и квантовой теории рассеяния.
- 1.7. Особенности рассеяния при приближении частоты возбуждения к частоте электронного перехода.

#### **Тема №2. «Теория колебаний молекул»**

- 2.1. Классический осциллятор.
- 2.2. Колебания многоатомных молекул.
- 2.3. Квантовый осциллятор.
- 2.4. Нормальные колебания и нормальные координаты.
- 2.5. Вековое уравнение.
- 2.6. Вращательные состояния двухатомных молекул.

#### **Тема 3. «Теория колебаний кристаллов».**

- 3.1. Типы фононов в кристаллах.
- 3.2. Дисперсия фононов.
- 3.3. Зоны бриллюэна.
- 3.4. Плотность фононных состояний. Особенности ван Хова.
- 3.5. Правила отбора по волновому вектору.
- 3.6. Продольно-поперечное расщепление колебаний в полярных кристаллах.

#### **Тема №4. «Симметрия колебаний»**

- 4.1. Симметрия колебаний молекул, координаты симметрии и эквивалентные координаты.
- 4.2. Матрицы преобразования колебательных координат.
- 4.3. Вырожденные и невырожденные колебания.
- 4.4. Группы симметрии молекул и кристаллов.
- 4.5. Неприводимые представления.
- 4.6. Симметрия колебаний кристаллов.

#### **Тема №5. «Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии»**

- 5.1. Анализ колебаний молекул.
- 5.2. Полное колебательное представление.
- 5.3. Общая процедура анализа колебаний кристаллов по симметрии.
- 5.4. Анализ колебаний смешанных ионно-ковалентных кристаллов.
- 5.5. Внешние и внутренние колебания кристаллов.
- 5.6. Выбор корреляций между неприводимыми представлениями позиционной и кристаллической структур.
- 5.7. Статическое и динамическое расщепление внутренних колебаний.
- 5.8. Трансляционные и либрационные колебания.

#### Тема №6 «Раман-тензор и правила отбора в колебательных спектрах»

- 6.1. Поляризуемость молекул и кристаллов. Раман-тензор.
- 6.2. Преобразование координат.
- 6.3. Преобразование Раман-тензора.
- 6.4. Физические причины возникновения правил отбора по симметрии.
- 6.5. Правила отбора процессов рассеяния первого порядка.
- 6.6. Правила отбора процессов рассеяния второго порядка. Прямое произведение.

#### Тема №7 «Техника спектроскопии КР»

- 7.1. Блок-схема спектрометра КР.
- 7.2. Современные типы спектрометров КР.
- 7.3. Разрешающая способность спектрального устройства.
- 7.4. Конфокальность и передача изображения на входную щель.
- 7.5. Контур спектральной линии.
- 7.6. Поляризационные измерения.
- 7.7. «Утечка» поляризации.
- 7.8. В чем физические и технические особенности ИК- и КР-спектроскопии.
- 7.9. Поверхностно-усиленное рамановское рассеяние.
- 7.10. Резонансное рассеяние.
- 7.11. Гиперкомбинационное рассеяние.
- 7.12. Когерентное антистоксово и когерентное стоксово рамановское рассеяние.

#### Тема №8 «Частота, ширина и интенсивность линий в колебательных спектрах»

- 8.1. Концепция характеристических колебаний. Особенности и пределы применимости. Роль характеристических колебаний в колебательной спектроскопии.
- 8.2. Кристаллические эффекты в колебательных спектрах.
- 8.3. Физические основы конечной ширины линии. Связь с временем жизни и распадом фонона.
- 8.4. Интенсивность линий в спектрах КР.
- 8.5. Зависимость интенсивности от температуры.
- 8.6. Поляризация линий и угловая зависимость интенсивности колебательной моды.

#### Тема №9. «Амплитуда и ангармонизм колебаний»

- 9.1. Вывести выражение для амплитуды колебаний.
- 9.2. Величина амплитуды колебаний по отношению к длине связи.
- 9.3. Форма реального потенциала межатомного взаимодействия.
- 9.4. Разложение потенциала взаимодействия и типы ангармонизма.
- 9.5. Ангармонические вклады.
- 9.6. Ангармонические вклады в кристаллах с различными типами химической связи.
- 9.7. Ангармоническое взаимодействие нормальных колебаний.
- 9.8. Влияние изотопозамещения на колебательные спектры.
- 9.9. Проявление нулевых колебаний в спектрах изотопически чистых составов.

#### Тема №10. «Рассеяние света в стеклах и наночастицах»

- 10.1. Проявление дефектности кристалла в фоннном спектре.
- 10.2. Причина «складывания» зон.
- 10.3. Возникновение бозонного пика в неупорядоченных средах.
- 10.4. Локализация фононов в наночастицах.
- 10.5. Моделирование спектра рассеяния на наночастицах.

#### Тема №11. «Водородная связь».

- 11.1. Типы водородных связей.
- 11.2. Природа водородной связи и основные характеристики.
- 11.3. Особенности О-Н...О водородной связи.
- 11.4. N-H...O связь.
- 11.4. C-H...Y водородная связь.
- 11.5. Физические аспекты особенностей водородных связей

**Тема №12. «Колебания молекул Н<sub>2</sub>О в полостях кристаллов».**

- 12.1. Частота колебаний Н<sub>2</sub>О в полостях кристаллов.
- 12.1. Полуширина линий колебаний Н<sub>2</sub>О.
- 12.3. Определение ориентации Н<sub>2</sub>О в полости.
- 12.4. Характер взаимодействия Н<sub>2</sub>О с кристаллическим окружением.
- 12.5. Свободное вращение Н<sub>2</sub>О в полости берилла.
- 12.6. Проявление ядерной изомерии в спектрах Н<sub>2</sub>О в берилле.

**Тема №13. «Колебания молекулярных кристаллов.».**

- 13.1. Межмолекулярные взаимодействия в молекулярных кристаллах.
- 13.2. Особенности в приготовлении образцов и регистрации спектров молекулярных кристаллов.
- 13.3. Общая характеристика колебательных спектров молекулярных кристаллов.
- 13.4. Что дают поляризационные измерения ориентированных молекулярных кристаллов.
- 13.5. Роль температурных измерений в исследовании молекулярных кристаллов.
- 13.6. Измерения степени ангармоничности колебательных мод.

**Пример экзаменационного билета**

1. Физический процесс и основные положения теории рамановского рассеяния.
2. Зависимость интенсивности рассеяния от длины волны падающего излучения в прозрачных средах.

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 «Колебательная ИК и КР 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