

**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**

академик РАН



УТВЕРЖДАЮ

Декан ФФ

А. Е. Бондарь

« 04 » 10 2020 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**СОВРЕМЕННАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 1, семестр 1**  
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	72	24	12	16	8	8	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 56 часов, - в интерактивных формах 28 часов.										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:

к.ф.-м.н.

Зав. кафедрой ХибФ ФФ НГУ

д.ф.-м.н., проф.

Руководитель программы

д.ф.-м.н.

А.П. Пыряева

С. А. Дзюба

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2020

## Содержание

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

## Аннотация

к рабочей программе дисциплины «Современная молекулярная спектроскопия»

Направление: **03.04.02 Физика**

**Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика**

Программа курса «Современная молекулярная спектроскопия» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная 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 в любых видах спектроскопии на примере оптических спектров (инфракрасного поглощения, комбинационного рассеяния и люминесценции) молекул в жидком состоянии. В ходе изучения данной дисциплины магистранты должны получить и освоить информацию о возможностях и фактическом состоянии молекулярной спектроскопии.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующих профессиональных компетенций:

**ПК-1 способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта**

**ПК-2 способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** основные законы, описывающие ИК и КР спектры и спектры люминесценции;
- **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, лабораторные занятия, 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 **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

## 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 в любых видах спектроскопии на примере оптических спектров (инфракрасного поглощения, комбинационного рассеяния и люминесценции) молекул в жидком состоянии. В ходе изучения данной дисциплины магистранты должны получить и освоить информацию о возможностях и фактическом состоянии молекулярной спектроскопии

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (*в части современной молекулярной спектроскопии*) и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Профессиональная компетенция ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики (*в части современной молекулярной спектроскопии*), необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

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.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** основные законы, описывающие ИК и КР спектры и спектры люминесценции (ПК-1.1).
- **Уметь:** использовать эти законы для исследования задач молекулярной физики и биофизики (описания структуры молекул и свойств жидкостей и газов) (ПК-1.2).
- **Владеть:** спектроскопическими методами определения структуры и свойств молекул. (ПК-2.3).

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современная молекулярная спектроскопия» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика в качестве дисциплины по выбору. 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	72	24	12	16	8	8	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 56 часов, - в интерактивных формах 28 часов.										
Компетенции ПК-1, 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

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, лабораторные занятия, 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 **72** академических часа / **2** 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 2 зачётные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Сам. работа во время занятий (не включая период	Сам. работа во время промежуточной аттестации	Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах)
			Всего	Аудиторные часы							
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия					

							сессии			
1	2	3	4	5	6		7	8	9	10
1.	Введение. Молекулярная спектроскопия.	1	2	2						
2	Колебательная спектроскопия. Инфракрасные спектры (ИК) поглощения.	2	8	2		4	2			
3	Теория интенсивностей в ИК-спектрах.	3	4	2		2				
4.	Теория интенсивностей в спектрах КР.	4	6	2		2	2			
5.	Правила отбора в колебательных спектрах.	5	2	2						
6.	Расчет собственных колебаний.	6	4	2			2			
7.	Квантово-механическое описание взаимодействия двух осцилляторов. Резонанс Ферми.	7	2	2						
8.	Характеристические группировки и частоты. Общая картина колебательного спектра углеводов.	8	2	2						
9.	Форма спектральных линий.	9	2	2						
10.	Спектроскопия водородной связи.	10	4	2			2			
11.	Электронная спектроскопия. Спектры поглощения и люминесценции. Основные законы люминесценции.	11	4	2		2				

12.	Флуоресценция и фосфоресценция	12	4	2		2				
13.	Поляризация люминесценции.	13	2		2					
14.	Процессы тушения люминесценции. Тепловое тушение. Тушение посторонней примесью. Формула Штерна-Фольмера.	14	2		2					
15.	Контактный и дистанционный механизм тушения. Теория диффузионного тушения (с учётом нестационарности и диффузии). Концентрационное тушение и миграция энергии. Теория резонансной миграции Фёрстера.	15	4		4					
16.	Сенсибилизированная люминесценция. Триплет-триплетная миграция.	16	4		4					
	Групповая консультация		2						2	
17.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		8					8		
18.	Экзамен		4						2	2
<b>Всего</b>			<b>72</b>	<b>24</b>	<b>12</b>	<b>16</b>	<b>8</b>	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>2</b>

**Программа и основное содержание лекций (24 часа)**

*Тема 1.* Введение. Общий обзор современной спектроскопии: от гамма-излучения до радиоволн. Молекулярная спектроскопия. Разделение электронного, колебательного и вращательного движения молекулы. (2 часа)

*Тема 2.* Колебательная спектроскопия. Классическое и квантовое решение колебательной задачи. Нормальные координаты. Обертоны и составные тоны. Проявление колебательных переходов в инфракрасном (ИК) поглощении и комбинационном рассеянии (КР). (2 часа)

*Тема 3.* 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. (4 часа)

*Тема 4.* Степень деполяризации линий КР. Расчёт интенсивности и степени деполяризации для ансамбля хаотически ориентированных молекул. (4 часа)

*Тема 5.* Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул. Полностью симметричные колебания. Правило альтернативного запрета. Правила Плачека для степени деполяризации линий КР. (2 часа)

*Тема 6.* Расчёт частот собственных колебаний молекулы. Естественные координаты. Векторное 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. (2 часа)

*Тема 7.* Форма спектральных линий. 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. Различие в уширении поляризованных и деполаризованных линий в КР. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение линий. Статистический контур. Доплеровское уширение. Провал Лэмба. Спектральная диффузия и сужение статистического контура при быстром обмене. (2 часа)

*Тема 8.* Спектроскопия водородной связи. Проявление водородной связи в частоте, интенсивности и ширине валентных полос ОН-групп. Модуляционная и флуктуационная теории уширения полос Н-связи. Температурная трансформация формы контура.

*Тема 9.* Электронная спектроскопия. 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. (2 часа)

*Тема 10.* Флуоресценция, фосфоресценция и замедленная флуоресценция: природа и условия наблюдения. Импульсный метод исследования триплет-триплетных переходов (флеш-фотолиз). (2 часа)

### **Программа практических занятий (12 часов)**

1. Поляризация люминесценции (2 часа)
2. Процессы тушения люминесценции. Тепловое тушение. Тушение посторонней примесью. Формула Штерна-Фольмера. (2 часа)
3. Контактный и дистанционный механизм тушения. Теория диффузионного тушения (с учётом нестационарности диффузии). Концентрационное тушение и миграция энергии. Теория резонансной миграции Фёрстера. (4 часа)
4. Сенсibilизированная люминесценция. Триплет-триплетная миграция. (4 часа)



### Программа лабораторных занятий (16 часов)

1. Измерение ИК-спектров поглощения и отражения (4 часа).
2. Отнесение линий в ИК-спектрах простых соединений (2 часа).
3. Отнесение линий в КР-спектрах простых соединений (2 часа).
4. Измерение спектров электронного поглощения. (4 часа).
5. Спектры флуоресценции и фосфоресценции (4 часа).

### Самостоятельная работа студентов (16 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	8 часов
Подготовка к экзамену	8 часов

#### 5. Перечень учебной литературы.

##### 5.1. Основная литература

1. *Наберухин Ю.И.* Лекции по молекулярной спектроскопии. Новосибирск: НГУ, 1973. (Текст книги значительно превышает по объему материал лекций, детализируя их.)
2. *Ельшевич М.А.* Атомная и молекулярная спектроскопия. Общие вопросы спектроскопии. М. Либроком. 2012

##### 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.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

Суровцев Н.В. Спектроскопия конденсированных сред. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2010.  
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**

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 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 заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы 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.

лем 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.

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

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.	Минимально допустимый уровень знаний. 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 2.3	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.

### 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  $\text{CH}_2\text{O}$  – плоская  
Определить для нее:

- полное количество колебаний и их симметрию;
  - изобразить форму колебаний;
  - какие колебания активны в ИК, а какие в КР-спектрах;
  - сколько линий будут наблюдаться в ИК и КР-спектрах;
  - степень деполяризации колебаний, разрешенных в КР, пояснить ответ.
2. Для температуры 1000 °С рассчитать отношение количества молекул на возбужденном и основном колебательных уровнях, считая, что энергия возбужденного уровня на 1000 см<sup>-1</sup> выше соответствующего основного уровня энергии. Колебательные уровни невырождены.
  3. Вращательный КР-спектр молекулы <sup>19</sup>F<sub>2</sub> состоит из серии стоксовых линий разнесенных друг от друга на 3.53 см<sup>-1</sup> и такой же серии антистоксовых линий. Определить длину связи молекулы.
  4. Рассчитать во сколько раз отличаются частоты основных  $\nu=1 \leftarrow 0$  переходов молекул <sup>1</sup>H<sup>35</sup>Cl и <sup>2</sup>D<sup>37</sup>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  $W' < W$ .

### Вопросы на экзамен

*На проверку сформированности компетенции ПК-1:*

1. Молекулярная спектроскопия. Разделение электронного, колебательного и вращательного движения молекулы.
2. Нормальные координаты. Обертоны и составные тоны
3. Интенсивность колебательных переходов в ИК и КР (по Эйнштейну). Спонтанное и вынужденное КР.
4. Степень деполяризации линий КР. Расчёт интенсивности и степени деполяризации для ансамбля хаотически ориентированных молекул.
5. Правила отбора в колебательных спектрах и их связь с симметрией молекул.
6. Правила Плачека для степени деполяризации линий КР.
7. Вековое уравнение. Прямая и обратная спектральные задачи.
8. Квантово-механическое описание взаимодействия двух осцилляторов. Резонанс Ферми.

*На проверку сформированности компетенции ПК-2:*

9. Характеристические группировки и частоты. Общая картина колебательного спектра углеводородов.
10. Модель Лоренца уширения линий в газах. Корреляционная теория формы линий.
11. Механизмы уширения спектральных линий в жидкостях. Марковский шум. Броуновское вращение как основной источник уширения.
12. Спектроскопия водородной связи. Проявление водородной связи в частоте, интенсивности и ширине валентных полос ОН-групп.
13. Колебательная структура электронных переходов – вибронные спектры. Связь спектров люминесценции со спектрами поглощения. Закон Стокса и правило зеркальной симметрии Лёвшина.
14. Флуоресценция, фосфоресценция и замедленная флуоресценция: природа и условия наблюдения. Импульсный метод исследования триплет-триплетных переходов (флеш-фотолиз).
15. Процессы тушения люминесценции. Тепловое тушение. Тушение посторонней примесью. Формула Штерна-Фольмера.

## Пример экзаменационного билета

<p>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</p> <p>Физический факультет</p>
<p><b>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</b></p> <p>1. Механизмы тушения люминесценции. Столкновительная деактивация (на компетенцию ПК-1).</p> <p>2. Энергия колебательных уровней многоатомных молекул. Влияние ангармоничности. Обертоны (на компетенцию ПК-2).</p> <p>3. Однородное уширение линий. Случай столкновительной дезактивации (на компетенции ПК-1, ПК-2).</p> <p>Составитель _____ / Пыряева А.П. / (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 ____ г.</p>

**Лист актуализации фонда оценочных средств  
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