

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

ОДОБРЕНО НТС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/04-577

от 27.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 16.03.01 Техническая физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
7	2	72	16	32	0		24	0	3
Итого	2	72	16	32	0	0	24	0	

АННОТАЦИЯ

Учебная дисциплина предназначена для ознакомления студентов с основами вращательной, колебательной и электронной спектроскопии молекул, а также для получения навыков практической работы со справочными данными по анализу и идентификации спектров.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- ознакомление студентов с основами вращательной, колебательной и электронной спектроскопии молекул;
- изучение практической работы со справочными данными по анализу и идентификации спектров.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Дисциплина является основой формирования знания студентов в области молекулярной спектроскопии. Студент должен прослушать курс общей физики, знать основы физики твердого тела, основы вакуумной техники, физические основы методов исследования поверхности. Учебная дисциплина не является предшествующей к какому-либо другому курсу.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
Применение эффективных методов исследования физико-технических объектов, процессов и материалов. Проведение стандартных и сертификационных	Наноразмерные системы, атомно-молекулярные смеси, масс-спектрометрия и спектрометрия ионной подвижности, композиционные	ПК-2.1 [1] - Способен участвовать в проведении теоретических и аналитических исследований в предметной области, в построении физических,	3-ПК-2.1[1] - Знать физико-теоретические концепции, аналитические методы, методы обработки экспериментальных данных в области физики

испытаний технологических процессов и изделий с использованием современных аналитических средств технической физики.	материалы.	математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений. <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.044, 40.104, 40.167	наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.; У-ПК-2.1[1] - Уметь применять физико-теоретические концепции, аналитические методы, методы обработки экспериментальных данных в области физики наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.; В-ПК-2.1[1] - Владеть аналитическими методами, методами обработки экспериментальных данных в области физики наноразмерных и неравновесных систем, масс-спектрометрии и спектрометрии ионной подвижности, композиционных материалов.
производственно-технологический			
Использование нормативных документов по качеству, стандартизации и сертификации изделий, элементов экономического анализа в практической	Наноразмерные системы, атомно-молекулярные смеси, масс-спектрометрия и спектрометрия ионной подвижности, композиционные материалы.	ПК-3 [1] - Способен использовать технические средства для определения основных параметров технологического процесса, изучения свойств физико-технических объектов, изделий и материалов	З-ПК-3[1] - Знать технические средства для определения основных параметров технологического процесса, свойств физико-технических объектов, изделий и материалов ; У-ПК-3[1] - Уметь

деятельности.		<i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.136, 40.167	использовать технические средства для определения параметров технологического процесса, свойств физико-технических объектов, изделий и материалов ; В-ПК-3[1] - Владеть техническими средствами определения параметров технологического процесса, изучения свойств физико-технических объектов, изделий и материалов
---------------	--	--	---

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (В18)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования у студентов ответственности за свое профессиональное развитие посредством выбора студентами индивидуальных образовательных траекторий, организации системы общения между всеми участниками образовательного процесса, в том числе с использованием новых информационных технологий.

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практи. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
----------	---	--------	---	---	----------------------------------	---	---------------------------------------

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозна чение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недел и	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем. , час.	Лаб., час.
------------	---------------------------	---------------	--------------------	---------------

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозна чение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Дисциплина реализует компетентностный подход и предусматривает широкое использование в учебном процессе активных форм проведения занятий, а также, проведение занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков студентов.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-2.1	З-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-2.1	З, КИ-8, КИ-16
ПК-3	З-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-3	З, КИ-8, КИ-16

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – <i>«отлично»</i>	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – <i>«удовлетворительно»</i>	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – <i>«неудовлетворительно»</i>	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает

			существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.
--	--	--	---

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ Н23 Spectroscopy and Optical Diagnostics for Gases : , Cham: Springer International Publishing, 2016
2. ЭИ Ш77 Атомная и молекулярная спектроскопия : , [Москва]: [МИФИ], 2008
3. 535 К 43 Современные методы оптической спектроскопии технологических сред : учеб. пособие для вузов, Москва: Юрайт, 2019
4. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия Ч.3 Молекулярная спектроскопия, , : URSS, 2007

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.2 Ф50 Физические основы методов исследования наноструктур и поверхности твердого тела : учебное пособие для вузов, В. И. Троян [и др.], Москва: МИФИ, 2008
2. 539.1 Е59 Атомная и молекулярная спектроскопия : общие вопросы спектроскопии пособие для вузов, М. А. Ельяшевич, Москва: Либроком, 2011

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При изучении дисциплины студенту необходимо освоить теоретические основы молекулярной спектроскопии.

Нужно получить представление о классификации спектров электромагнитного излучения по диапазону электромагнитного излучения, видам взаимодействия излучения с веществом, типам энергетических уровней и переходов между ними. Необходимо знать выражения для вероятности спонтанного и вынужденного испускания и вероятности поглощения. Рассмотреть случаи дипольного электрического и магнитного излучения и квадрупольного электрического излучения.

Нужно усвоить структуру вращательных уровней двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора, классификацию молекул на основе соотношения моментов инерции относительно главных осей симметрии. Уметь вывести выражения для энергии вращательных уровней молекул типа сферического волчка, симметричного вытянутого и сплющенного волчка. Знать, к чему приводит учет нежесткости связи в молекуле. Знать зависимость заселенности вращательных состояний в условиях термодинамического равновесия. Понимать различие в степени вырождения вращательных уровней для сферического, симметричного и асимметричного волчка.

Необходимо знать структуру колебательных уровней двухатомной молекулы и колебательных переходов между ними. Знать выражение для колебательной энергии в приближении гармонического и ангармонического осцилляторов. Знать правила отбора для колебательных переходов. Понимать вращательную структуру (ветви) колебательного спектра.

Нужно иметь представление о системе электронных уровней энергии атома и молекулы. Усвоить понятие молекулярных орбиталей. Вспомнить основные понятия, вводимые для описания электронного состояния молекулы. Разбираться в молекулярных терминах и их связи с атомными состояниями. Понимать, как устроена форма молекулярных орбиталей, используя для основы метод линейной комбинации атомных орбиталей.

Студенту необходимо знать колебательную структуру электронных спектров, тонкую вращательную структуру электронно-колебательных спектров. Знать понятие канта полосы.

Необходимо научиться из спектральных данных рассчитывать молекулярные постоянные. Нужно понимать принцип Франка-Кондона и научиться работать с таблицами Деландра. Необходимо понимать явление изотопного сдвига и уметь решать соответствующие задачи.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

При преподавании дисциплины необходимо дать возможность студентам освоить теоретические основы молекулярной спектроскопии.

Нужно рассказать о классификации спектров электромагнитного излучения по диапазону электромагнитного излучения, видам взаимодействия излучения с веществом, типам энергетических уровней и переходов между ними. Необходимо привести выражения для вероятности спонтанного и вынужденного испускания и вероятности поглощения.

Нужно рассмотреть структуру вращательных уровней двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора, рассмотреть классификацию молекул на основе соотношения моментов инерции относительно главных осей симметрии. Вывести выражения для энергии вращательных уровней молекул типа сферического волчка, симметричного вытянутого и сплющенного волчка. Объяснить зависимость заселенности вращательных состояний в

условиях термодинамического равновесия. Объяснить различие в степени вырождения вращательных уровней для сферического, симметричного и асимметричного волчка.

Необходимо рассмотреть структуру колебательных уровней двухатомной молекулы и колебательных переходов между ними. Получить выражение для колебательной энергии в приближении гармонического и ангармонического осцилляторов. Указать правила отбора для колебательных переходов. Рассмотреть вращательную структуру (ветви) колебательного спектра.

Нужно рассмотреть электронные уровни энергии атома и молекулы. Ввести понятие молекулярных орбиталей. Напомнить основные понятия, вводимые для описания электронного состояния молекулы. Рассмотреть молекулярные термы и их связь с атомными состояниями. Рассказать о форме молекулярных орбиталей, используя для основы метод линейной комбинации атомных орбиталей.

Рассмотреть колебательную структуру электронных спектров. Рассмотреть тонкую вращательную структуру электронно-колебательных спектров. Ввести понятие канта полосы.

Необходимо научить из спектральных данных рассчитывать молекулярные постоянные. Нужно пояснить принцип Франка-Кондона и научить работать с таблицами Деландра. Необходимо объяснить понятие изотопного сдвига на примере решения задач.

Автор(ы):

Троян Виктор Иванович, д.ф.-м.н., профессор

Борман Владимир Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор

Пушкин Михаил Александрович, к.ф.-м.н.

Белогорлов Антон Анатольевич, к.ф.-м.н., доцент

Рецензент(ы):

Ю.П. Нещименко