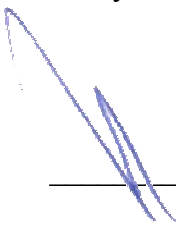


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

Согласовано
Декан ФЕН
Резников В.А.


_____ подпись

«05» __октября__ 2020 г.

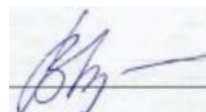
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Молекулярная спектроскопия

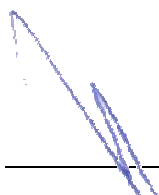
направление подготовки: 04.06.01 Химические науки
направленность (профиль): Физическая химия

Форма обучения: очная

Разработчики:
д.х.н., профессор Плюснин В.Ф.



Ответственный за образовательную программу:
профессор, д.х.н. В.А. Резников



Новосибирск, 2020

Содержание:

1.	3	
2.	3	
3.	4	
4.	5	
5.	5	
6.	6	
7.	6	
7.1	Ресурсы сети Интернет	6
7.2	Современные профессиональные базы данных:	6
8.	6	
8.1	Перечень программного обеспечения	6
	Информационные справочные системы	6
9.	6	
10.	7	
10.1	Порядок проведения текущего контроля по дисциплине	7
	Текущий контроль успеваемости:	7
	Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Молекулярная спектроскопия»	7
	Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения	9

Приложение 1 Аннотация по дисциплине

Приложение 2 Оценочные средства по дисциплине

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

Индикатор компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1)
ОПК-1.1 Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований	Способность определять виды ионизирующего излучения, знать величины потерь энергии при прохождении ионизирующего излучения через различные среды, рассчитывать параметры действия ионизирующего излучения строения на различные молекулярные системы, представлять спектральные и кинетические параметры активных промежуточных частиц, возникающих при действии ионизирующего излучения на вещество. Представлять последствия действия радиационного облучения на биологические объекты
	ПК-1 Способность экспериментально определять и рассчитывать параметры строения молекул, пространственные структуры и термодинамические свойства веществ, термодинамические функции простых и сложных систем, кинетические и термодинамические параметры химических и физико-химических процессов
ПК-1.2 Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул и пространственных структур	- Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул, пространственных структур и спектральных характеристик
	ПК-2 Способность изучать физико-химические свойства систем при различных внешних воздействиях, исследовать механизмы равновесных и неравновесных процессов, устанавливать связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции
ПК-2.1 Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их реакционную способность	- Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их спектральные характеристики
	ПК-3 Способность изучать межмолекулярные и межчастичные взаимодействия в растворах и кристаллах, исследовать динамику элементарных актов и механизмы элементарных реакций с участием активных частиц

ПК-3.1 Знать основные положения теории растворов, основные типы механизмов элементарных реакций	- знать основные положения молекулярной спектроскопии, уметь применять теорию групп для классификации электронных состояний сложных молекул, знать правила отбора для дипольных переходов.
---	--

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «**Молекулярная спектроскопия**» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 – Химические науки направленность Физическая химия по *очной* форме обучения на *русском* языке. Дисциплина «**Молекулярная спектроскопия**» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры, и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации), для аспирантов, обучающихся по направленности «Физическая химия».

Место в образовательной программе: Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» реализуется в составе профессионального модуля «Физическая химия» в 5 семестре в рамках вариативной части дисциплин (модулей) Блока 1 и является базовой для осуществления научно-исследовательской деятельности и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации).

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма аттестации: 5 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		5
1	Лекции, час.	32
2	Практические занятия, час.	0
3	Лабораторные занятия, час	0
4	Занятий в контактной форме без учета промежуточной аттестации, час, из них	36
5	в электронной форме, час.	0
6	из них аудиторных занятий, час.	32
7	из них в активной и интерактивной форме, час.	10
8	консультаций, час.	2
9	Самостоятельная работа, час.	36

10	в том числе на выполнение письменных работ, час	0
11	Форма аттестации (экзамен, зачет, дифференцированный зачет), час	Э
12	Всего зачетных единиц	2

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

При освоении дисциплины аспиранты выполняют следующие виды учебной работы: лекции, консультации, самостоятельная работа. В учебном процессе предусматривается использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Каждое лекционное занятие содержит элементы диалога преподавателя с аспирантами, поскольку каждый из участников – аспиранты или преподаватель имеют право задавать вопросы в ходе решения проблемы или задачи и участвовать в ее разборе. Таким образом, на лекциях реализуется интерактивная форма обучения. Преподаватель курса является действующими специалистом в области молекулярной спектроскопии и фотохимии. В связи с этим аспирантам часто предлагается решать не умозрительные шаблонные задачи, а задачи, построенные на реальных объектах, приближенных к практике научных исследований.

Лекции (32 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Атомная спектроскопия, классификация электронных состояний двухатомных и линейных молекул.	8
Теория групп для описания электронных состояний сложных молекул, правила отбора для дипольных переходов.	4
Электронная спектроскопия, типы и интенсивность переходов.	4
Люминесценция молекулярных систем, процессы передачи энергии.	8
Спектроскопия координационных соединений.	8

Самостоятельная работа аспирантов (36 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная работа во время занятий из них:	26
Уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях	26
Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации из них:	10
подготовка к экзамену	10

5. Перечень учебной литературы

1. Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина, Основы молекулярной спектроскопии, М. изд. Мир. 2008, 398 с.
2. Ч.П. Пулмл. Ф. Дж. Оуэнс, Мир материалов и технологий, Киев. Изд. Техносфера, 2009 336 с.
3. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир,

1992.

4. Степанов А. Г., Талзи Е. П. ЯМР-спектроскопия. Новосибирск: Изд. НГУ, 1997.
5. Степанов А. Г., Талзи Е. П. Практикум по физической химии. ЯМР спектроскопия. 2003
6. Брыляков К. П. Основы импульсной ЯМР спектроскопии: Изд. НГУ, 2002.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

7. Паукштис Е.А. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Применение ИК спектроскопии. Новосибирск Институт катализа, 2010. 55с.
8. Паукштис Е.А., Ларина Т.В., Глазнева Т.С., Шалыгин А.С. А.С. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Часть 2. Спектроскопия в УФ и Видимом диапазонах. Новые методики колебательной спектроскопии для изучения поверхности. Институт катализа им. Борескова СО РАН, 2012

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

7.1 Ресурсы сети Интернет

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.
- «Российская национальная платформа открытого образования» (<http://openedu.ru/>), Coursera (www.coursera.org), edX (www.edx.org).

7.2 Современные профессиональные базы данных:

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

8.1 Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Информационные справочные системы

Не используются.

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

Для реализации дисциплины *Молекулярная спектроскопия* используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций и промежуточной аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, индивидуальных консультаций и промежуточной аттестации (письменного тестирования), помимо укомплектованности специализированной учебной мебелью, должна быть обеспечена компьютером, ноутбуком или нетбуком с подключённым медиа-проектором, позволяющим транслировать изображение на демонстрационный экран.

Для выполнения домашних заданий и самостоятельных работ в рамках курса «Молекулярная спектроскопия» обучающимся предоставляется доступ к внутриинститутской компьютерной сети через подразделения Института, в которых они проходят исследовательскую практику, и доступ к сервисам сети Интернет, необходимым для выполнения заданий по курсу.

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

Перечень результатов обучения по дисциплине «Молекулярная спектроскопия» и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля по дисциплине

Текущий контроль успеваемости:

Формой текущего контроля при прохождении дисциплины является контроль посещаемости занятий.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Молекулярная спектроскопия»

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результаты обучения по дисциплине	Оценочное средство
ОПК-1	ОПК-1.1 Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований	Знать основные положения колебательной спектроскопии, природу фундаментальных переходов. Уметь использовать теорию групп для определения симметрии колебательных состояний, знать правила отбора для определения разрешенных переходов в ИК и КР спектроскопии. Уметь определять симметрию колебаний линейных молекул. Представлять механизмы работы лазеров, типы лазеров, используемых в колебательной спектроскопии. Представлять механизмы спонтанного и вынужденного излучения, связанных с коэффициентами Эйнштейна. Знать	Экзамен

		нелинейные процессы, которые используются в современных методах колебательной спектроскопии. Знать процессы вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) (Stimulated Raman scattering, SRS). Представлять механизмы процессов гигантского комбинационного рассеяния (Surface Enhanced Raman Spectroscopy - SERS).	
ПК-1	ПК-1.2 Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул и пространственных структур	- Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул, пространственных структур и спектральных характеристик	Экзамен
ПК-2	ПК-2.1 Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их реакционную способность	- Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их спектральные характеристики	Экзамен
ПК-3	ПК-3.1 Знать основные положения теории растворов, основные типы механизмов элементарных реакций	- знать основные положения молекулярной спектроскопии, уметь применять теорию групп для классификации электронных состояний сложных молекул, знать правила отбора для дипольных переходов.	Экзамен

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p>Экзамен : Теоретические вопросы: – наличие полных ответов на все вопросы с не принципиальными неточностями, – осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, – точность и корректность применения терминов и понятий</p>	<i>Отлично</i>
<p>Экзамен :</p>	<i>Хорошо</i>

<p><i>Теоретические вопросы:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие полных ответов на все вопросы с несущественными ошибками, – осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явлений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок. 	
<p><u>Экзамен :</u></p> <p><i>Теоретические вопросы:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками, – осмысленность и структурированность в изложении материала, наличие ошибок в логике, аргументации и объяснении отдельных процессов и явлений, – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок. 	<p><i>Удовлетворительно</i></p>
<p><u>Экзамен :</u></p> <p><i>Теоретические вопросы:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов не на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками, – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий. 	<p><i>Неудовлетворительно</i></p>

Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примерные теоретические вопросы к экзамену

1. Что-такое g-фактор, что такое химический сдвиг. Анизотропия g-фактора и химического сдвига. Характерные g-фактора для радикалов и комплексов переходных металлов с $S = \frac{1}{2}$.
2. Форма линий ЭПР и ЯМР поликристаллических образцов. Определение главных значений тензора химического сдвига и g-фактора из экспериментальных спектров.
3. Связь величины g-фактора с параметрами расщепления d-орбиталей в кристаллическом поле и константой спин орбитального взаимодействия.
4. Уравнение Блоха. Что такое T_1 и T_2 . Почему сигнал ЯМР имеет лоренцеву форму с шириной $1/T_2$.
5. Эффект Оверхаузера. Величина эффекта. Как из данных по эффекту Оверхаузера определить структуру молекулы.
6. Что такое декаплинг.
7. Что такое 90° импульс. Как часто и как долго необходимо оцифровывать спад свободной индукции. Измерение T_1 и T_2 .
8. Перенос поляризации. Селективный перенос поляризации. Процедура INEPT, объяснить на векторной модели принципы работы.
9. Как с помощью J – модуляции различить CH_2 и CH атомы углерода.
10. Основные принципы двумерной J - спектроскопии и двумерной корреляционной спектроскопии. Уметь анализировать простые спектры.
11. Вращение под магическим углом. Для чего нужно вращение и какова должна быть его скорость.
12. Кросс-поляризация. Соотношение Хартмана Хана.

Примерные типы задач, решаемых на экзамене

(1) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.06$; $g_3 = 2.06$; $A_1 = 50 \text{ G}$, $A_2 = 50 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 1$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(2) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.06$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0 \text{ G}$, $A_2 = 0 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 1/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(3) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 1.96$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0$ G, $A_2 = 0$ G; $A_3 = 80$ G; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 3/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(4) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.00$; $g_3 = 2.29$; $A_1 = 0$ G, $A_2 = 0$ G; $A_3 = 80$ G; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 5/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(5) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.25$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0$ G, $A_2 = 0$ G; $A_3 = 80$ G; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 7/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы дисциплины
«Молекулярная спектроскопия»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Подпись ответственного

Аннотация

к рабочей программе дисциплины

«Молекулярная спектроскопия»Направление подготовки: **04.06.01 Химические науки**Направленность (профиль): **Физическая химия**

Дисциплина «**Молекулярная спектроскопия**» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 – Химические науки направленность Физическая химия по *очной* форме обучения на *русском* языке. Дисциплина «**Молекулярная спектроскопия**» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры, и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации), для аспирантов, обучающихся по направленности «Физическая химия».

Место в образовательной программе: Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» реализуется в составе профессионального модуля «Физическая химия» в 5 семестре в рамках вариативной части дисциплин (модулей) Блока 1 и является базовой для осуществления научно-исследовательской деятельности и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации).

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» направлена на формирование компетенций:

Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1), в части следующих результатов обучения:

ОПК-1.1 Знать основные способы и приемы проведения научных и научно-технических исследований.

Знать основные положения колебательной спектроскопии, природу фундаментальных переходов. Уметь использовать теорию групп для определения симметрии колебательных состояний, знать правила отбора для определения разрешенных переходов в ИК и КР спектроскопии. Уметь определять симметрию колебаний линейных молекул. Представлять механизмы работы лазеров, типы лазеров, используемых в колебательной спектроскопии. Представлять механизмы спонтанного и вынужденного излучения, связанных с коэффициентами Эйнштейна. Знать нелинейные процессы, которые используются в современных методах колебательной спектроскопии. Знать процессы вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) (Stimulated Raman scattering, SRS). Представлять механизмы процессов гигантского комбинационного рассеяния (Surface Enhanced Raman Spectroscopy - SERS).

ПК-1 Способность экспериментально определять и рассчитывать параметры строения молекул, пространственные структуры и термодинамические свойства веществ, термодинамические функции простых и сложных систем, кинетические и термодинамические параметры химических и физико-химических процессов, в части следующих результатов обучения:

ПК-1.2 Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул и пространственных структур.

- Иметь навыки экспериментального определения и расчета параметров строения молекул, пространственных структур и спектральных характеристик

ПК-2 Способность изучать физико-химические свойства систем при различных внешних воздействиях, исследовать механизмы равновесных и неравновесных процессов, устанавливать связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции, в части следующих результатов обучения:

ПК-2.1 Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их реакционную способность.

- Знать основные типы физико-химических процессов, протекающих в системах при различных внешних воздействиях; знать основные параметры строения веществ, влияющие на их спектральные характеристики.

ПК-3 Способность изучать межмолекулярные и межчастичные взаимодействия в растворах и кристаллах, исследовать динамику элементарных актов и механизмы элементарных реакций с участием активных частиц, в части следующих результатов обучения:

ПК-3.1 Знать основные положения теории растворов, основные типы механизмов элементарных реакций

- знать основные положения молекулярной спектроскопии, уметь применять теорию групп для классификации электронных состояний сложных молекул, знать правила отбора для дипольных переходов.

Перечень основных разделов дисциплины:

Атомная спектроскопия, классификация электронных состояний двухатомных и линейных молекул.

Теория групп для описания электронных состояний сложных молекул, правила отбора для дипольных переходов.

Электронная спектроскопия, типы и интенсивность переходов.

Люминесценция молекулярных систем, процессы передачи энергии.

Спектроскопия координационных соединений.

При освоении дисциплины аспиранты выполняют следующие виды учебной работы: лекции, консультации, самостоятельная работа. В учебном процессе предусматривается использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Каждое лекционное занятие содержит элементы диалога преподавателя с аспирантами, поскольку каждый из участников – аспиранты или преподаватель имеют право задавать вопросы в ходе решения проблемы или задачи и участвовать в ее разборе. Таким образом, на лекциях реализуется интерактивная форма обучения. Преподаватель курса является действующими специалистом в области молекулярной спектроскопии и фотохимии. В связи с этим аспирантам часто предлагается решать не умозрительные шаблонные задачи, а задачи, построенные на реальных объектах, приближенных к практике научных исследований.

Самостоятельная работа включает: самостоятельное изучение теоретического материала по разделам дисциплины, подготовку к кандидатскому экзамену.

Общий объем дисциплины – 2 зачетные единицы (72 часа).

№	Вид деятельности	Семестр
		5
1	Лекции, час.	32
2	Практические занятия, час.	0
3	Лабораторные занятия, час	0

4	Занятий в контактной форме без учета промежуточной аттестации, час, из них	36
5	в электронной форме, час.	0
6	из них аудиторных занятий, час.	32
7	из них в активной и интерактивной форме, час.	10
8	консультаций, час.	2
9	Самостоятельная работа, час.	36
10	в том числе на выполнение письменных работ, час	0
11	Форма аттестации (экзамен, зачет, дифференцированный зачет), час	Э
12	Всего зачетных единиц	2

Правила аттестации по дисциплине. Текущий контроль по дисциплине проводится в форме контроля посещаемости занятий, а также неформализованного опроса аспирантов по пройденным темам.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Молекулярная спектроскопия» проводится в виде экзамена.