

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



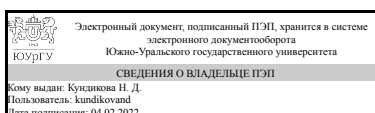
А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.06.02 Спектроскопия
для направления 03.06.01 Физика и астрономия
уровень аспирант тип программы
направленность программы
форма обучения очная
кафедра-разработчик Оптоинформатика

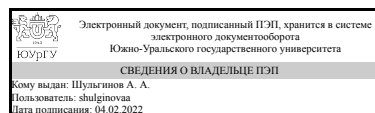
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 867

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ.-мат.н., проф.



Н. Д. Кундикова

Разработчик программы,
к.физ.-мат.н., доц., доцент



А. А. Шульгинов

1. Цели и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Спектроскопия» является овладение теоретическими основами молекулярной спектроскопии и физическими принципами исследования молекулярных систем. Задачами дисциплины «Спектроскопия» являются а) овладение методами расчета основных спектроскопических характеристик простых и органических веществ; б) подготовка аспиранта к научным исследованиям в области спектроскопии и преподаванию дисциплин, базирующихся на спектроскопии; в) формирование профессиональных компетенций, необходимых для осуществления профессиональной деятельности по предусмотренным настоящим стандартом видам.

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина «Спектроскопия» посвящена изучению методов современной оптической спектроскопии для проведения фундаментальных и прикладных исследований физических, химических, биологических процессов в различных средах (газы, жидкости, кристаллы, металлы, диэлектрики, полупроводники, гетерогенные структуры, плёнки, композитные материалы, наноматериалы, биоматериалы и др.). Рассматриваются фундаментальные основы теории взаимодействия излучения с веществом, основополагающие физические модели для описания оптических явлений и результатов экспериментов.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Знать: современное состояние науки в области молекулярной спектроскопии и использования результатов исследований в научной деятельности
	Уметь: представлять научные результаты в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях в области спектроскопии
	Владеть: навыками планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по спектроскопии
УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Знать: нормативные документы для составления заявок, грантов, проектов НИР по молекулярной спектроскопии требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях по спектроскопии
	Уметь: готовить заявки на получение научных грантов и заключения контрактов по НИР в области спектроскопии самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области спектроскопии
	Владеть: навыками составления и подачи конкурсных заявок на выполнение научно-

исследовательских и проектных работ по спектроскопии навыками самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области спектроскопии

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	П.1.В.04 Математическое моделирование, Научно-исследовательская деятельность (3 семестр), Научно-исследовательская деятельность (4 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Умение пользоваться оптическим абсорбционным спектрометром

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		1	2
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108	
<i>Аудиторные занятия:</i>	40	40	
Лекции (Л)	40	40	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	0	0	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	68	68	
Подготовка реферата	24	24	
Подготовка к экзамену	12	12	
Подготовка к коллоквиуму	14	14	
Подготовка к контрольным работам	18	18	
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен	

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Взаимодействие света с веществом	10	10	0	0

2	Оптическая спектроскопия	10	10	0	0
3	Инфракрасная спектроскопия и спектроскопия вынужденного комбинационного рассеяния	10	10	0	0
4	Лазерная спектроскопия	10	10	0	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Гамильтониан нерелятивистской материальной системы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Дипольное приближение, оператор дипольного момента, энергия взаимодействия поля и молекулы. Резонансное взаимодействие	2
2	1	Нерезонансное взаимодействие, виртуальный уровень. Решение задачи: двухуровневая система + независящее от времени взаимодействие. Оператор эволюции, частота Раби.	2
3	1	Уравнение Максвелла, случай плоской стационарной волны, диэлектрическая функция, линейная восприимчивость. Закон Бугера–Ламберта–Берра. Связь показателя преломления и линейной восприимчивости. Модель Лоренца: линейный осциллятор во внешнем световом поле. Линейная восприимчивость, форма линии спектра поглощения, коэффициент поглощения, показатель преломления, нормальная, аномальная дисперсия, сила осциллятора. Квантовомеханическое обоснование модели Лоренца	2
4	1	Двухуровневая система, стационарное решение и уравнения для поляризуемости. Ширина спектральных линий. Однородное и неоднородное уширение. Приближение медленно меняющихся амплитуд. Укороченные волновые уравнения. Переизлученное поле. Приближение вращающейся волны. Оптические уравнения Блоха. Решения уравнений Блоха: случай стационарного внешнего поля, оптическое затухание свободной поляризации, понятия о первичном световом эхе и стимулированном световом эхе.	2
5	1	Анизотропные материалы, основные эффекты кристаллооптики. Классификация кристаллов. Обыкновенная и необыкновенная волны. Наведенная анизотропия. Основные эффекты нелинейной оптики. Механизмы оптической нелинейности. Нелинейная поляризация. Нелинейная восприимчивость. Генерация второй гармоники.	2
6	2	Релеевское рассеяние света. Тензор поляризуемости молекул. Влияние сопряжения на поляризуемость молекул.	2
7	2	Оптический и электрооптический эффект Керра. Применение релеевского рассеяния и эффекта Керра для определения поляризуемости молекул	2
8	2	Разделение электронного, колебательного и вращательного движения молекул. Спинорбитальное взаимодействие. Конфигурационное взаимодействие. Сила осциллятора. Интеграл момента перехода. Правила отбора в УФ спектроскопии. Переходы с переносом заряда.	2
9	2	Хромофоры и их характеристичность. Простые и сопряженные хромофоры.	2
10	2	Электронные переходы в молекулах органических соединений: $\sigma \rightarrow \sigma^*$, $n \rightarrow \sigma^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$. Колебательная структура электронных переходов.	2
11	3	Основы ИК и КР спектроскопии. Нормальные колебания и их свойства. Поглощение излучения молекулярными колебаниями. Правила отбора в КР и ИК спектроскопии. Интенсивность линий в КР и ИК-спектрах. Стоксовая, антистоксовая компоненты КР.	2
12	3	Спонтанное КР, вынужденное КР. Характеристические группировки и частоты в КР и ИК спектроскопии. Вибронные переходы. Классификация	2

		молекул по виду вибронных спектров. Принцип Франка–Кондона.	
13	3	Основные законы люминесценции: затухание люминесценции, закон Стокса, правило зеркальной симметрии Лёвшина, правило Каша. Флюоресценция и фосфоресценция. Интеркомбинационные переходы. Задержанная флюоресценция.	2
14	3	Триpletное поглощение. Кинетическая схема люминесценции: стационарный случай, кинетика люминесценции.	2
15	3	Квантовый выход. Формула Каша. Спектр возбуждения. Процессы деактивации электронного возбуждения.	2
16	4	Суперконтинуум. Синхронное детектирование. Оптическое гетеродинамирование. Принципиальная оптическая схема «возбуждающий – зондирующий импульсы»	2
17	4	Предельно короткие импульсы света и сверхсильные световые поля. Фемтосекундные технологии: фемтосекундный титан-сапфировый лазер, фазовый модулятор, компенсатор дисперсии групповой скорости, линия задержки.	2
18	4	Типы времяразрешенных экспериментов: поглощение/ просветление среды, поглощение из возбужденного состояния, флюоресценция, когерентное комбинационное рассеяние, фотонное эхо, поляризационные эксперименты, наведенная решетка, наведенная линза.	2
19	4	Режимы работы лазеров. Непрерывные и импульсный режимы. Пичковый режим. Модуляция добротности. Синхронизация мод. Генерация сверхкоротких импульсов. Принципы адаптивной оптики; коррекция волнового фронта лазерных пучков.	4

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	не предусмотрено	0

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	1	не предусмотрено	0

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к экзамену	Беккер, Ю. Спектроскопия [Текст] Ю. Беккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с. ил., табл.	12
Подготовка реферата	Беккер, Ю. Спектроскопия [Текст] Ю. Беккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с. ил., табл.	24
Подготовка к контрольным работам	Беккер, Ю. Спектроскопия [Текст] Ю. Беккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. -	18

	М.: Техносфера, 2009. - 527 с. ил., табл.	
Подготовка к коллоквиуму	Беккер, Ю. Спектроскопия [Текст] Ю. Беккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с. ил., табл.	14

6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Инновационные формы учебных занятий	Вид работы (Л, ПЗ, ЛР)	Краткое описание	Кол-во ауд. часов
Объектно - ориентированный поиск	Самостоятельная работа студента	Поиск в интернете последних достижений в области ИК спектроскопии	5

Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Инновационные формы обучения	Краткое описание и примеры использования в темах и разделах
Свободная дискуссия	Обсуждение по теме 2 -применения ВКР в научных исследованиях

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: нет

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Лазерная спектроскопия	УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Коллоквиум	11-12
Взаимодействие света с веществом	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Контрольная работа 1	1-4
Инфракрасная спектроскопия и спектроскопия вынужденного комбинационного рассеяния	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Контрольная работа 3	8-10
Оптическая спектроскопия	УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том	Контрольная работа 2	5-7

	числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки		
Все разделы	УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Реферат	14-15

7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
Контрольная работа 1	Каждому студенту выдается билет, в котором 5 вопросов. В течении 30 минут студенты письменно отвечают на вопросы.	Отлично: Данная оценка ставится при правильном ответе на все вопросы Хорошо: Данная оценка ставится при правильном ответе на 4 вопроса Удовлетворительно: Данная оценка ставится при правильном ответе на 3 вопроса Неудовлетворительно: Данная оценка ставится при правильном ответе на менее 3 вопроса
Контрольная работа 2	Студентам выдается билет, в котором 5 вопросов. В течении 30 минут студенты письменно отвечают на вопросы.	Отлично: Правильные ответы на 5 вопросов Хорошо: Правильные ответы на 4 вопроса Удовлетворительно: Правильные ответы на 3 вопроса Неудовлетворительно: Правильные ответы на 1 и 2 вопроса
Контрольная работа 3	Студентам выдаются билеты, состоящие из 5 вопросов, на которые они отвечают письменно в течении 25 минут.	Отлично: Правильные ответы на 5 вопросов Хорошо: Правильные ответы на 4 вопроса Удовлетворительно: Правильные ответы на 3 вопроса Неудовлетворительно: Правильные ответы на 1 и 2 вопроса
Коллоквиум	Студентам выдаются билеты, состоящие из 5 вопросов, на которые они готовят ответы в течении 25 минут.	Зачтено: Правильные ответы на 3 и более вопросов Не зачтено: менее 3 правильно отвеченных вопроса
Реферат	Студент пишет реферат, объемом не менее 30 страниц. Тема реферата выбирается в начале семестра. Реферат должен содержать список ссылок на оригинальные источники, 60 процентов которых должны быть не старше 10 лет	Отлично: данная оценка ставится если студент проанализировал более 60 оригинальных статей Хорошо: данная оценка ставится если студент проанализировал от 40 до 50 оригинальных статей Удовлетворительно: данная оценка ставится если студент проанализировал от 30 до 39 оригинальных статей

		Неудовлетворительно: данная оценка ставится если студент проанализировал от менее 30 оригинальных статей
--	--	--

7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
Контрольная работа 1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Основные характеристики электромагнитного излучения. Спектральные и цветовая области, их использование при исследовании строения атомов и молекул. 2. Ширина линии спектра. Причины уширения. Однородное и неоднородное уширение. 3. Квантовые состояния атома. Система квантовых чисел электрона в атоме, их возможные значения. Принцип Паули. 4. Многоэлектронные атомные системы. Электронная конфигурация. Самосогласованное поле, квантовые числа. Терм, мультиплетность терма. Правила отбора для электронных переходов в атоме. 5. Исследование спектров поглощения. Закон Бера. Коэффициент поглощения. Факторы, ограничивающие применение закона Бера. Методика построения энергетической диаграммы атомных уровней примесных атомов по экспериментальным спектрам поглощения и люминесценции. 6. Спектры люминесценции. Закон спектрального преобразования излучения. Способы монохроматизации излучения. Фотоэлектрокалориметр, оптическая схема, принцип действия. 7. Однолучевые спектрофотометры для регистрации спектров поглощения и люминесценции. Двухлучевой спектрофотометр. Их назначение, оптические схемы, принцип действия. 8. Двухволновой спектрофотометр. Спектрофотометр с двойной монохроматизацией. Их назначение, оптические схемы, принцип действия. 9. Источники излучения видимого и УФ диапазонов. Виды источников, их конструкция, их назначение.
Контрольная работа 2	<ol style="list-style-type: none"> 1. Естественная ширина спектральных линий 2. спектры кристаллов. Спектры отражения 3. Производящая функция оптического перехода 4. Спектры экситонов 5. Поляризационная спектроскопия 6. Спектры магнитного резонанса 7. Модель Дике в теории сверхизлучения
Контрольная работа 3	<ol style="list-style-type: none"> 1. Чем сопровождается поглощение веществом ИК излучения? 2. Чем обусловлены проявления колебаний в ИК-спектрах? 3. Какие колебания активны в ИК-спектрах? 4. Какие колебания активны в ВКР-спектрах? 5. Сравните энергии и волновые числа валентных и деформационных колебаний. 6. Классификация деформационных колебаний. 7. Число колебательных степеней свободы у нелинейной и линейной молекул, состоящих из N атомов. 8. Какие растворители используются в ИК-спектроскопии?
Коллоквиум	<ol style="list-style-type: none"> 1. Применение лазеров в спектроскопии. 2. Методы перестройки частоты генерации. 3. Линейная абсорбционная лазерная спектроскопия, ограниченная доплеровским уширением. 4. Внутррезонаторные методы регистрации спектров поглощения. 5. Спектроскопия возбуждения. 6. Оптоакустическая спектроскопия. 7. Оптогальваническая спектроскопия.

	8. Ионизационная спектроскопия. 9. Лазерный магнитный резонанс. 10. Штарковская спектроскопия. 11. Методы двойного резонанса. 12. Многофотонная спектроскопия. Вероятности двухфотонных переходов. 13. Экспериментальная реализация метода многофотонной спектроскопии. 14. Спектроскопия насыщения. Основные принципы и экспериментальная реализация. 15. Использование спектроскопии насыщения для стабилизации частоты лазеров. 16. Спектроскопия связанных переходов.
Реферат	1. 2D корреляционная спектроскопия 2. Оптическая абсорбционная спектроскопия тонких полупроводниковых пленок 3. Терагерцовая спектроскопия комбинационного рассеяния 4. Абсорбционная спектроскопия с временным разрешением 5. Флуоресцентная спектроскопия с временным разрешением 6. Спектральные методы анализа трансмутации химических элементов

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Молекулярная спектроскопия : основы теории и практика [Текст] учеб. пособие для вузов по направлению 020400 "Биология" и смеж. специальностям Ф. Ф. Литвин и др.; под ред. Ф. Ф. Литвина. - М.: ИНФРА-М, 2014. - 261, [2] с. ил.
2. Шмидт, В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов [Текст] В. Шмидт ; пер. с англ. Н. П. Ивановской ; под ред. С. В. Савилова. - М.: Техносфера, 2007. - 363, [3] с. ил.
3. Вилков, Л. В. Физические методы исследования в химии: Структурные методы и оптическая спектроскопия [Текст] Учеб. для хим. спец. вузов Л. В. Вилков, Ю. А. Пентин. - М.: Высшая школа, 1987. - 366 с. ил.
4. Беккер, Ю. Спектроскопия [Текст] Ю. Беккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с. ил., табл.

б) дополнительная литература:

1. Банкер, Ф. Р. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия Пер. с англ. под ред. М. Р. Алиева. - М.: Мир, 1981. - 451 с. ил.
2. Бойко, В. А. Рентгеновская спектроскопия многозарядных ионов . - М.: Энергоатомиздат, 1988. - 189,2 с. ил.
3. Браун, Д. Спектроскопия органических веществ Пер. с англ. А. А. Кирюшкина. - М.: Мир, 1992. - 300 с. ил.
4. Далидчик, Ф. И. Спектроскопия поверхности. - М.: Знание, 1982. - 64 с. ил.
5. Кизель, В. А. Практическая молекулярная спектроскопия Учеб. пособие. - М.: Издательство МФТИ, 1998. - 254 с. ил.
6. Летохов, В. С. Лазерная фотоионизационная спектроскопия. - М.: Наука, 1987. - 318 с. ил.

7. Ливер, Э. Электронная спектроскопия неорганических соединений: В 2 ч. Ч. 1 Пер. с англ. Ю. В. Ракитина; Под ред. А. Ю. Цивидзе. - М.: Мир, 1987. - 491 с. ил.

8. Электронная спектроскопия [Текст] пер. с англ. К. Зигбан и др.; под ред. И. Б. Боровского. - М.: Мир, 1971. - 493 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Оптика и спектроскопия

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Спектроскопия

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Спектроскопия

Электронная учебно-методическая документация

Нет

9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Office(бессрочно)
2. Math Works-MATLAB, Simulink R2014b(бессрочно)
3. -Maple 13(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)
2. -База данных ВИНТИ РАН(бессрочно)

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	607 (16)	Компьютер, проектор