

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Физическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
<p>СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач</p>	<p>Знать: основы теории колебаний молекул в рамках классической теории малых колебаний и квантовохимической теории строения молекул, физические и математические модели силовых полей многоатомных молекул, Уметь: уметь формулировать обратные задачи в рамках различных моделей силовых полей, проводить интерпретацию экспериментальных данных колебательной спектроскопии с использованием результатов решения задачи о колебаниях молекул Владеть: основными методами решения обратных задач колебательной спектроскопии с помощью программы СПЕКТР; навыками использования дополнительных данных для интерпретации колебательных спектров многоатомных молекул.</p>
<p>СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии.</p>	<p>Знать возможности и ограничения современных расчетных методов молекулярной спектроскопии при решении практических задач, возникающих при обработке экспериментальных данных. Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач</p>
<p>СПК-5.С. Способность проводить квантовохимические расчеты</p>	<p>Знать: методы обработки экспериментальных данных колебательной спектроскопии в рамках современных устойчивых численных методов с применением результатов</p>

молекулярных систем различного строения с использованием современных программных комплексов.	квантовохимических расчетов. Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических расчетов. Уметь: работать с программами обработки результатов квантовохимического расчета при совместном использования экспериментальных и теоретических данных при решении обратных задач молекулярной спектроскопии
--	---

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы (зачет), всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: Для изучения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в результате изучения соответствующих разделов физики, оптики, квантовой механики и математических дисциплин - природа электромагнитного излучения, типы взаимодействия его с веществом; основные определения и фундаментальные понятия квантовомеханической теории строения молекул; базовых знания о современных вычислительных возможностях квантовой химии.

Уметь: пользоваться программами визуализации результатов расчетов и обработки экспериментальных данных.

Владеть: современным языком математической формализации тех физических задач, которые возникают при анализе спектральных данных.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

аттестации по дисциплине (модулю)		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1 Поглощение и комбинационное рассеяние.	8	2	2				4	4		4
Тема 2. Симметрия молекул.	10	2	4				6	4		4
Тема 3 Молекулы типа симметричного, сферического и асимметричного волчка	8	2	2				4	4		4
Тема 4. Вращательные спектры многоатомных молекул.	8	2	2				4	4		4
Тема 5. Колебания многоатомных молекул.	8	2	2				4	4		4
Тема 6. Колебательно-вращательное взаимодействие, проявление в спектрах.	8	2	2				4	4		4
Тема 7. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР)	8	2	2				4	4		4

Тема 8. Расчетные методы в колебательно-вращательной спектроскопии.	12	4	2	2			8	4		4
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40	32		32

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из Интернет-ресурсов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. Основы молекулярной спектроскопии. Москва. Бином.2008.
2. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Ю.А.Пентин, А.Г.Ягола. Обратные задачи колебательной спектроскопии. Москва. КУРС, 2017.
3. В.И.Тюлин. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул : Введение в теорию. Москва : Изд-во МГУ, 1987.– 204 С.

Дополнительная литература

1. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. Москва. Эдиториал УРСС. 1999.
2. P.F. Bernath. Spectra of atoms and molecules. Oxford, University Press, 2005.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

1. в.н.с., д.х.н., доцент Курамшина Гульнара Маратовна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, kuramshi@phys.chem.msu.ru, +7(495)939-29-50
2. доцент, д.ф-м.н. Пазюк Елена Александровна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, pazyuk@phys.chem.msu.ru, +7(495)939-28-25

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета:

1. Квантовомеханический подход к описанию вращательных и колебательных спектров многоатомных молекул.
2. Симметрия молекул. Правила отбора в ИК и КР спектрах.
3. Анализ нормальных колебаний и определение симметрии молекул с использованием экспериментальных данных по ИК и КР спектрам.
4. Интенсивности линий. Параллельные и перпендикулярные полосы. Структура полос горячих переходов. Анализ вращательной структуры.
5. Линейные молекулы: вращательные состояния, симметрия и спин системы.
6. Линейные молекулы: колебательный момент, кориолисово взаимодействие и l -удвоение, типы полос в спектрах ИК-поглощения.
7. Инфракрасный спектр поглощения линейной молекулы. Правила отбора и матричные элементы для вращательных переходов.
8. Правила отбора в спектрах ИК-поглощения и КР для вращательных переходов многоатомных молекул типа симметричного волчка.
9. Инфракрасный спектр поглощения молекулы типа симметричного волчка. Параллельные и перпендикулярные полосы. Чередование интенсивностей.
10. Правила отбора в спектрах ИК-поглощения и КР многоатомных молекул.
11. Анализ структуры молекулы по предложенному спектру ИК-спектру поглощения.
12. Для какого агрегатного состояния вещества из сопоставления ИК и КР спектров получают наиболее надежные данные о симметрии молекулы и почему?
13. Как согласовать определение нормального колебания и понятие характеристической или групповой частоты?

14. Каковы отличия вращательной спектроскопии КР от микроволновой спектроскопии? от ИК спектроскопии? Как ИК и КР спектры взаимно дополняют друг друга?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: основы теории колебаний молекул в рамках классической теории малых колебаний и квантовохимической теории строения молекул, физические и математические модели силовых полей многоатомных молекул.</p> <p>Знать возможности и ограничения современных расчетных методов молекулярной спектроскопии при решении практических задач, возникающих при обработке экспериментальных данных.</p> <p>Знать: методы обработки экспериментальных данных колебательной спектроскопии в рамках современных устойчивых численных методов с применением результатов квантовохимических расчетов.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на</p>

<p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования.</p> <p>Уметь: уметь формулировать обратные задачи в рамках различных моделей силовых полей, проводить интерпретацию экспериментальных данных колебательной спектроскопии с использованием результатов решения задачи о колебаниях молекул.</p> <p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических расчетов.</p> <p>Уметь: работать с программами обработки результатов квантовохимического расчета при совместном использования экспериментальных и теоретических данных при решении обратных задач молекулярной спектроскопии.</p>	зачете
<p>Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: основными методами решения обратных задач колебательной спектроскопии с помощью программы СПЕКТР; навыками использования дополнительных данных для интерпретации колебательных спектров многоатомных молекул.</p> <p>Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач.</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете