

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)

Основы молекулярной спектроскопии

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) **Основы молекулярной спектроскопии**
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)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	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
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ Уметь: формулировать задачи моделирования молекулярных систем Владеть: навыками обоснованного выбора средств решения задач современной физической химии
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.	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
СПК-5.С. Способность проводить квантовохимические расчеты молекулярных систем различного строения с использованием современных программных комплексов	Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических расчетов Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы

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, всего 72 часа, из которых 32 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (14 часов занятия лекционного типа, 14 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 40 часа составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: Основы линейной алгебры и математического анализа, квантовой механики в объеме курсов физико-математического цикла и цикла дисциплин, относящихся к строению молекул и квантовой химии в базовой части обучения.

Владеть: Навыками использования базовых знаний дисциплин физико-математического цикла при решении проблем физической химии, в том числе с привлечением информационных баз данных.

Уметь: Находить взаимосвязи между микроскопическими параметрами строения молекул и макроскопическими физико-химическими свойствами вещества.

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. Общая характеристика методов молекулярной спектроскопии.	10	2	2				4	4	2	6
Тема 2. Вращательный спектр молекул. Определение дипольных моментов молекул. Эффект Штарка.	8	2	2				4	4		4
Тема 3. Колебательный и колебательно-вращательный спектр молекул. Активность колебаний в ИК-спектрах.	10	2	2				4	4	2	6
Тема 4. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул, физические причины характеристичности колебаний	10	2	2				4	4	2	6
Тема 5. Электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.	10	2	2				4	4	2	6

Тема 6. Взаимосвязь электронных спектров и структуры молекул органических веществ.	10	2	2				4	4	2	6
Тема 7. Вычислительные методы в современной молекулярной спектроскопии	12	2	2	2			6	4	2	6
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	14	14	2		2	32	28	12	40

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. Бинوم.2008.
2. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. Москва. Эдиториал УРСС, 2001.

Дополнительная литература

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, тел.: +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, тел.: +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. Колебательная и вращательная структура энергетических уровней (основные модельные представления)
2. Свойства симметрии вращательных уровней.
3. Разрешенные и запрещенные электронные переходы.
4. Спин-орбитальное, спин-спиновое и спин-вращательное взаимодействия.
5. По каким признакам можно идентифицировать в УФ спектре полосы $n \rightarrow \pi^*$ перехода?
6. Почему для вибронных переходов запрет по орбитальному правилу отбора может нарушаться?
7. В чем различие явлений флуоресценции и фосфоресценции?
8. Как изменяются расстояния между колебательными термами молекулы: а) с увеличением квантового вращательного числа; б) при приближении к пределу диссоциации?
9. Как по ИК и КР спектрам вещества можно определить к какой точечной группе симметрии относится молекула?
10. Для какого агрегатного состояния вещества из сопоставления ИК и КР спектров получают наиболее надежные данные о симметрии молекулы и почему?
11. Как согласовать определение нормального колебания и понятие характеристической или групповой частоты?
12. Каковы отличия вращательной спектроскопии КР. от микроволновой спектроскопии? от ИК спектроскопии?
13. 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				
Здания	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: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ</p> <p>Знать: возможности и ограничения современных расчетных методов молекулярной спектроскопии при решении практических задач, возникающих при обработке экспериментальных данных.</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: формулировать задачи моделирования молекулярных систем</p> <p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических расчетов</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на 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: навыками обоснованного выбора средств решения задач современной физической химии</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> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации,</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы	
--	--