

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

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Прямые и обратные задачи колебательной спектроскопии**

**Уровень высшего образования:**  
Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Физическая химия

**Форма обучения:**  
очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p><b>СПК-1.М.</b> Способен использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач</p>	<p><b>СПК-1.М.2</b> Грамотно интерпретирует результаты физико-химического эксперимента и теоретических расчетов</p>	<p><b>Знать:</b> теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ и численных методов, использующихся при решении прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных .</p> <p><b>Уметь:</b> использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений</p> <p><b>Владеть:</b> основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных</p>
<p><b>СПК-3.М.</b> Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при планировании исследований, обработке и интерпретации данных в избранной области физической химии</p>	<p><b>СПК-3.М.1</b> Выбирает адекватные подходы и модели при обработке данных физико-химического эксперимента</p> <p><b>СПК-3.М.2.</b> Оценивает возможности и качество программных продуктов для выполнения квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов</p>	<p><b>Знать:</b> основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований; возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач.</p> <p><b>Владеть:</b> навыками интерпретации колебательных спектров молекул с учетом результатов квантовохимических расчетов и результатов решений прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных.</p> <p><b>Уметь:</b> использовать программные продукты для решения прямых и обратных задач, возникающих в колебательной спектроскопии с привлечением дополнительных данных, получаемых другими экспериментальными методами и результатов квантовохимических расчетов.</p> <p><b>Владеть:</b> основными навыками решения прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и результатов квантовохимических расчетов.</p>

3. Объем дисциплины (модуля) составляет **3** зачетных единицы, всего **108** часа, из которых **48** часов составляет контактная работа студента с преподавателем (**19** часов занятия лекционного типа, **19** часов – занятия семинарского типа, **6** часов - индивидуальные консультации, **4** часа – промежуточный контроль успеваемости), **60** часов составляет самостоятельная работа студента.

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

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физика», «Физическая химия», «Строение молекул», «Квантовая химия».

**Знать:** Для изучения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в результате изучения соответствующих разделов физики, квантовой механики и математических дисциплин, а также компетенции, относящиеся к использованию современных вычислительных комплексов в области квантовой химии и колебательной спектроскопии.

**Уметь:** работать с компьютером на уровне пользователя, использовать в научных целях базы структурных и спектральных данных.

**Владеть:** основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		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. Экспериментальные методы колебательной спектроскопии	<b>9</b>	2	2		<b>1</b>		<b>5</b>	4		<b>4</b>

Физическая и математическая модели колебаний молекул.										
Тема 2. Модели силовых полей. Выбор обобщенных координат.	<b>12</b>	4	4		<b>1</b>		<b>9</b>	3		<b>3</b>
Тема 3. Прямая и обратная спектроскопическая задача.	<b>12</b>	4	4		<b>1</b>		<b>9</b>	3		<b>3</b>
Тема 4. Развитие методов решения обратных задач колебательной спектроскопии	<b>6</b>	2			<b>1</b>		<b>3</b>	3		<b>3</b>
Тема 5. Понятие регуляризирующего алгоритма. Нелинейные некорректные задачи.	<b>10</b>	3	3		<b>1</b>		<b>7</b>	3		<b>3</b>
Тема 6. Обратная колебательная задача с учетом результатов квантово-химических расчетов.	<b>23</b>	4	6	2	<b>1</b>		<b>13</b>	10		<b>10</b>
Промежуточная аттестация: <u>экзамен</u>	<b>36</b>					4	<b>4</b>			<b>34</b>
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>19</b>	<b>19</b>		<b>6</b>	<b>4</b>	<b>48</b>	<b>26</b>		<b>60</b>

#### 6. 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.

#### 7. 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.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

### 1. Основная литература

2. Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. Основы молекулярной спектроскопии. Москва. Бином, Лаборатория знаний. 2008.
3. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Ю.А.Пентин, А.Г.Ягола . Обратные задачи колебательной спектроскопии. Москва, Издательство КУРС, 2017; Издательство Моск. Университета, 1993.

### Дополнительная литература

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

**Материально-техническое обеспечение:** специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (фломастерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

в.н.с., д.х.н., доцент Курамшина Гульнара Маратовна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,  
email: [kuramshi@phys.chem.msu.ru](mailto:kuramshi@phys.chem.msu.ru); +7(495)939-29-50.

### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

**Вопросы для экзамена:**

1. Экспериментальные методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры поглощения, спектры комбинационного рассеяния; интерпретация экспериментальных данных; определение погрешностей измерения частот.
2. Физическая модель колебаний молекул. Классическая теория малых колебаний. Упрощенная квантовомеханическая постановка задачи.

3. Полная постановка задачи о колебаниях. Колебательно-вращательное взаимодействие (классическое рассмотрение). Центробежное искажение (классическое рассмотрение).
4. Квантовомеханический подход: адиабатическое приближение; колебательно-вращательное взаимодействие; центробежное искажение. Адиабатическая теория возмущений.
5. Математические модели колебательного движения. Параметры модели. Неэмпирические методы. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы.
6. Модели силовых полей. Выбор обобщенных координат. Построение вспомогательных матриц. Использование зависимых координат. Учет симметрии при расчетах колебаний молекулы. Вычисление молекулярных постоянных в координатах симметрии.
7. Прямые и обратные задачи колебательной спектроскопии. Корректность постановки математической задачи. Некорректность задачи восстановления силового поля молекулы по экспериментальным данным.
8. Математическая постановка обратной колебательной задачи.
9. Использование результатов квантовомеханических расчетов при решении обратных задач колебательной спектроскопии.
10. Развитие методов решения обратных задач колебательной спектроскопии, стихийная регуляризация. Некорректность задачи отыскания нормального решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).
11. Понятие регуляризирующего алгоритма. Регуляризирующие алгоритмы отыскания нормального решения СЛАУ.
12. Нелинейные некорректные задачи. Обратная колебательная задача для одной молекулы.
13. Возможные постановки обратных задач. Совместный расчет силовых полей рядов многоатомных молекул.
14. Численные методы для отыскания собственных значений и собственных векторов. Методы минимизации функционалов, простые ограничения, метод линеаризации.
15. Оценка погрешности оператора и меры несовместности. Способы выбора параметра регуляризации. Основы численных методов, использующихся при решении обратной колебательной задачи.
16. Комплекс программ СПЕКТР: требования, предъявляемые к комплексу программ и общая структура комплекса. Подготовка входного файла для решения прямой и обратной задачи в различных постановках.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

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

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
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 неприципиального 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><b>Знать:</b> теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ и численных методов, использующихся при решении прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных</p> <p><b>Знать:</b> основные методы и критерии достоверности данных структурных исследований, их роль в физической химии; основы численных методов, использующихся для обработки колебательных спектров при совместном использовании результатов экспериментальных и теоретических исследований .</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<p><b>Уметь:</b> использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений</p> <p><b>Уметь:</b> использовать программные продукты для решения прямых и обратных задач, возникающих в колебательной спектроскопии с привлечением дополнительных данных, получаемых другими экспериментальными методами и результатов квантовохимических расчетов.</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<p><b>Владеть:</b> основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных</p> <p><b>Владеть:</b> навыками интерпретации колебательных спектров молекул с учетом результатов квантовохимических расчетов и результатов решений прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных.</p> <p><b>Владеть:</b> основными навыками решения прямых и обратных задач, возникающих при обработке экспериментальных данных молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и результатов квантовохимических расчетов</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете