

**Программа утверждена на заседании
Ученого Совета факультета наук о
материалах МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 195 от 07 июля 2017 г.**

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Методы колебательной спектроскопии для исследования функциональных материалов.**

Краткая аннотация: Спецкурс рассматривает подходы к исследованию функциональных материалов при помощи методов инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. В программу курса входит рассмотрение физических принципов возникновения колебательных спектров в молекулах и материалах, устройства современных приборов для регистрации колебательных спектров. Рассматриваются экспериментальные подходы к изучению основных типов функциональных материалов методами инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленность (профиль) Неорганическая химия, Химия твердого тела

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;	31 (УК-1) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно- коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные подходы и методы в колебательной спектроскопии
ПК-1 Способность к самостоятельному проведению научно-	31 (ПК-1) Знать современные подходы, применяемые в неорганической химии,

исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.01 Неорганическая химия	при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии
	У1 (ПК-1) Уметь использовать современные методы колебательной спектроскопии при решении практических задач в области неорганической химии
ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела	У1 (ПК-16) Уметь использовать данные колебательной спектроскопии для получения информации о составе, структуре и свойствах твердых тел.

6. Объем дисциплины (модуля) 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 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 48 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (20 часов занятия лекционного типа, 20 часов занятия семинарского типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 60 часов составляет самостоятельная работа учащегося.*

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия. В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Оптика», «Квантовая физика», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия», «Кристаллохимия», и спецкурсы, посвященные оптическим методам анализа.

8. 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. Введение. Инфракрасная спектроскопия поглощения и спектроскопия комбинационного рассеяния как методы исследования материалов: возможности и ограничения методов. Причины возникновения колебательных спектров.	8	2	2				4	4		4
Тема 2. Точечные группы симметрии. Матричные представления операций симметрии. Использование математического аппарата теории групп для предсказания и анализа колебательных спектров молекул и ионов.	16	4	4				8	8		8
Тема 3. Квантово-механическая модель молекулы. Адиабатическое приближение. Уравнение Шрёдингера и симметрия молекул. Нормальные координаты и нормальные колебания.	16	4	4				8	8		8
Тема 4. Использование фактор-группового анализа для интерпретации колебательных спектров кристаллов. Поляризованные спектры. Фононы в колебательных спектрах. Резонансное рамановское рассеяние.	16	4	4				8	8		8

Тема 5 Симметрия молекул и кристаллов и экспериментальные данные инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Отнесение полос в реальных спектрах материалов.	16	4	4				8	8		8
Тема 6. Устройство приборов для регистрации инфракрасных спектров и спектров комбинационного рассеяния для характеристики веществ и материалов.	8	2	2				4	4		4
Тема 7. Использование колебательной спектроскопии для анализа различных классов функциональных материалов.	12	4	4				8	4		4
Подготовка и защита реферата	12			2			2		10	10
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	4					4	4			
Итого							54			54

8. Образовательные технологии

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций; интерактивные лекции, в ходе которых аспиранты под контролем лектора выполняют задания, способствующие практическому усвоению лекционного материала; лекции-демонстрации проблемного характера, посвященные приемам выполнения различных этапов анализа, принципу работы и устройству приборов для регистрации и спектров. Демонстрации составлены на основе базовых и новейших мировых научных результатов, в том числе результатов исследований, проведенных авторами программы дисциплины. В заключительной части курса аспиранты готовят реферат по теме, связанной с использованием методов колебательной спектроскопии при выполнении ими диссертационной работы. В ходе курса используется интерактивная система дистанционного размещения материалов лекций и проверки полученных студентами знаний на портале distant.msu.ru (адрес <https://distant.msu.ru/course/index.php?categoryid=139>).

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень домашних заданий. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

- Базы данных Национального института стандартов и технологий: www.nist.gov
- Базы данных по материаловедению: materials.springer.com
- AIST – база спектральных данных для органических соединений: sdfs.db.aist.go.jp
- интерактивная система дистанционного размещения материалов лекций и проверки полученных студентами знаний на портале distant.msu.ru (адрес <https://distant.msu.ru/course/index.php?categoryid=139>).

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. К. Накамото. «ИК-спектры и спектры КР неорганических и комплексных соединений». М., Мир, 1991, 536 с.
2. К. Наканиси. «Инфракрасные спектры и строение органических соединений. Практическое руководство». М. Мир, 1965, 213 с.
3. Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. «Основы молекулярной спектроскопии. Методы в химии». М., Мир, 2008, 400 с.
4. D.C. Harris, M.D. Bertolucci «Symmetry and Spectroscopy». Dover Publications Inc., 1980, 576 с.

Дополнительная литература

1. G. Socrates. «Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies. Tables and Charts». 2001 John Wiley & Sons Ltd
2. Инфракрасная спектроскопия полимеров. Под ред. И. Деханта. ГДР, 1972. Пер. с нем., под ред. к.х.н. Э.Ф. Олейника. М., Химия, 1976.
3. Смит А., Прикладная ИК спектроскопия, Мир, М., 1982
4. Харрик Н., Спектроскопия внутреннего отражения, Мир, М., 1970.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели: Колесник Ирина Валерьевна, к.х.н., асс., kolesnik.iv@gmail.com

13. Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1. 2.

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.

- Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:

1. Какую информацию о качественном составе вещества или материала можно получить с использованием методов колебательной спектроскопии?
2. Каким образом проводится количественный анализ объектов методами колебательной спектроскопии?
3. Каковы правила отбора для полос в инфракрасных спектрах и спектрах комбинационного рассеяния?
4. Определите точечную группу симметрии молекулы и активность нормальных колебаний а инфракрасном спектре и спектре комбинационного рассеяния.
5. В каких условиях возникает эффект резонансного рамановского рассеяния?
6. В чем заключается адиабатическое приближение?
7. Что такое гармонический осциллятор?
8. Каковы общие черты и в чем заключаются различия с точки зрения наблюдаемых явлений и аппаратного оформления методов инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния?
9. Назовите примерный алгоритм действий при идентификации полос в колебательных спектрах веществ и материалов.
10. Перечислите и охарактеризуйте проблемы, возникающие при идентификации веществ и материалов с использованием баз данных.
11. Перечислите преимущества и ограничения различных способов регистрации инфракрасных спектров в режимах пропускания, нарушенного полного внутреннего отражения, диффузного отражения.
12. Перечислите, какие основные факторы играют роль при выборе режима регистрации спектра комбинационного рассеяния.
13. Каким образом при помощи ИК-спектроскопии изучают активные центры на поверхности катализатора?

• Образцы домашних заданий:

1. Освоение формул взаимосвязи между основными единицами измерения, используемыми в спектроскопии при решении вычислительных задач.
2. Определите точечную группу симметрии молекулы и активность нормальных колебаний а инфракрасном спектре и спектре комбинационного рассеяния.
3. По рекомендованной литературе изучите фактор-групповой анализ для химического соединения.
4. Предложите способ пробоподготовки и изготовления стандартных образцов для количественного анализа заданного объекта.
5. Идентифицируйте соединений по колебательному спектру, используя таблицы характеристических частот.
5. Изучите способы идентификации активных центров на поверхности катализаторов по ИК-спектрам адсорбированных молекул.
6. Изучите примеры установления механизмов реакций на каталитических центрах с использованием колебательной спектроскопии.

• Примерные темы рефератов:

1. Количественный анализ содержания карбонат- и нитрат-ионов в межслоевых пространствах слоистых соединений РЗЭ методами колебательной спектроскопии.
2. Идентификация фосфорсодержащих групп в аморфных фосфатах кальция методами колебательной спектроскопии.

3. Идентификация углеродных материалов методом спектроскопии комбинационного рассеяния.
4. Определение типа проводимости одностенных углеродных нанотрубок с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния.
5. Спектроскопия ИК катализаторов на основе оксидов металлов и анализ состояния поверхностных ОН-групп.
6. Изучение структуры цеолитов при помощи спектроскопии ЯМР на ядрах ^{29}Si .
7. Установление природы центров брэнстедовской и льюисовской кислотности оксидных катализаторов.
8. Изучение активных центров катализаторов с использованием молекул-зондов.

● Образцы вопросов для промежуточной аттестации – зачета:

к темам 1 – 3:

9. Что такое группа, ее свойства. Представления, перестановки, матрицы.
10. Точечные группы и их обозначения. Алгоритм определения точечной группы молекулы.
11. Матричные представления операций симметрии, таблицы характеров.
12. Уравнение Шредингера, адиабатическое приближение.
13. Возникновение ИК- и Рамановских спектров.
14. Спектры двухатомных молекул
15. Нормальные колебания более сложных молекул. Использование таблиц характеров.
16. Поляризованные спектры. Спектры кристаллов.
17. Резонансное рамановское рассеяние.
18. Устройство инфракрасного спектрометра. Принцип работы Фурье-спектрометра.
19. Преимущества ИК-фурье спектрометра для анализа материалов.
20. Устройство спектрометра для регистрации спектров комбинационного рассеяния.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет или экзамен проходит по билетам, включающим 2 вопроса: один – по темам №№1-5, второй – по темам №№6,7. Кроме этого, преподавателем оценивается также подготовленный аспирантом реферат по теме, связанной с его диссертационным исследованием. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу, а также качество подготовки реферата и ответы на дополнительные вопросы оцениваются по пятибалльной шкале. В случае, если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем на 3 балла, аспирант получает общую оценку «зачтено». На экзамене выставляется средняя оценка по 2 вопросам билета и реферату, округление – в пользу студента. Ведомость приема зачета или экзамена подписывается преподавателем, принимающим зачет или экзамен.

Приложение 1. Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Методы колебательной спектроскопии для исследования функциональных материалов» на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)						
	1	2	3	4	5	
З1 (УК-2) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области методов колебательной спектроскопии	Общие, но не структурированные знания в области методов колебательной спектроскопии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области методов колебательной спектроскопии	Сформированные систематические знания в области методов колебательной спектроскопии	зачет в форме индивидуального собеседования, реферат
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и методы и подходы в колебательной спектроскопии	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе и применении экспериментальных подходов и методов в колебательной спектроскопии	В целом успешно, но не систематически осуществляемое умение в выборе и применении экспериментальных подходов и методов в колебательной спектроскопии	В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы умения в выборе и применении экспериментальных подходов и методов в колебательной спектроскопии	Сформированное умение в выборе и применении экспериментальных подходов и методов в колебательной спектроскопии	письменное решение задач

31 (ПК-1) Знать современные подходы, применяемые в неорганической химии, при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных подходах, применяемых в неорганической химии, при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии	Неполные представления о современных подходах, применяемых в неорганической химии, при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современных подходах, применяемых в неорганической химии, при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии	Сформированное систематическое представление о современных подходах, применяемых в неорганической химии, при исследовании веществ и материалов методами колебательной спектроскопии	зачет в форме индивидуального собеседования, реферат
У1 (ПК-1) Уметь использовать современные методы колебательной спектроскопии при решении практических задач в области неорганической химии	Отсутствие умений	Интуитивный и не всегда верный выбор методов колебательной спектроскопии при исследовании неорганических веществ и материалов	Допускает отдельные ошибки при выборе методов колебательной спектроскопии при исследовании неорганических веществ и материалов	Выбирает правильные методы колебательной спектроскопии при исследовании неорганических веществ и материалов, но затрудняется предложить научное обоснование своего выбора	Умеет правильно выбрать и обосновывать методы колебательной спектроскопии при исследовании неорганических веществ и материалов,	письменное решение задач, реферат
У1 (ПК-16) Уметь использовать данные колебательной спектроскопии для получения	Отсутствие умений	Знает возможные методы колебательной спектроскопии, но для исследования конкретного	Аргументирует выбор метода колебательной спектроскопии, но учитывает только немногие факторы	Аргументировано выбирает методы колебательной спектроскопии для решения конкретных задач,	Грамотно и аргументировано выбирает методы колебательной спектроскопии для решения	письменное решение задач

информации о составе, структуре и свойствах твердых тел.		объекта выбирает их наобум		но некоторые факторы не учитывает	конкретных задач	
--	--	----------------------------	--	-----------------------------------	------------------	--