

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физики твердого тела и наноструктур

 (Середин П.В.)
05.06.2023г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.05.02 ИК-спектроскопия

1. Код и наименование направления подготовки/специальности: 03.03.02

Физика

2. Профиль подготовки/специализация:

Физика твёрдого тела

3. Квалификация выпускника: Бакалавр

4. Форма образования: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: физики твердого тела и наноструктур

6. Составители программы: Голощاپов Дмитрий Леонидович,
кандидат физ.-мат. наук,

7. Рекомендована: НМС физического факультета, протокол № 5 от 25.05.2023г.

8. Учебный год: 2027–2028

Семестр: 8

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

формирование у обучающихся теоретических основ колебательной спектроскопии, получение знаний об анализе инфракрасных спектров наноструктур с учетом теории симметрии и взаимосвязи спектральных характеристик функциональных материалов с их структурными свойствами, получение представлений об основных техниках инфракрасной спектроскопии и методиках анализа спектральных характеристик наноструктур.

Задачи учебной дисциплины:

– познакомить обучающихся с основными теоретическими понятиями и физическими процессами, приводящими к возникновению ИК спектров поглощения на основе квантовомеханического подхода к описанию колебательных спектров;

– изучить подходы к анализу колебаний молекул и кристаллов с учётом правил отбора на примере колебания двухатомных молекул, колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов для модельных наноструктур,

– получить представление об основных техниках инфракрасной спектроскопии, основных компонентах и типах инфракрасных спектрометров, а также методиках получения спектральных характеристик наноматериалов с использованием ИК-спектроскопии.

– сформировать знание об анализе и основных характеристиках инфракрасных спектров (характеристическая частота, полуширина полосы, интегральная интенсивность), а также факторов, влияющие на сдвиг колебаний и интенсивность полос поглощения для различных типов наноматериалов.

– получить навыки экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур с использованием инфракрасной спектроскопии; и освоить методы колебательной спектроскопии для идентификации функциональных материалов на основе структурно-группового, молекулярного и количественного анализов

–

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: часть, формируемая участниками образовательных отношений, блок Б1.

В результате прохождения данной дисциплины обучающийся должен приобрести знания, умения, навыки профессиональных компетенций, необходимых для обеспечения трудовых функций профессиональных стандартов:

40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»

– А/01.5 «Осуществление проведения работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований»;

40.104 «Специалист по измерению параметров и модификации свойств наноматериалов и наноструктур»

– С/01.6 «Модернизация существующих и внедрение новых методов и оборудования для измерений параметров наноматериалов и наноструктур»;

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты
-----	----------	--------	--------------	------------------------

	компетенции			обучения
ПК-2	Способен осуществлять выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок	ПК-2.1	Выбирает, обосновывает и реализует на практике эффективную методику экспериментального исследования параметров и характеристик материалов, приборов, схем, устройств и установок различного функционального назначения	Знать: методики экспериментального исследования параметров и характеристик материалов, приборов, схем, устройств и установок различного функционального назначения с использованием ИК-спектроскопии
				Уметь: выбирать и обосновывать методики экспериментального исследования параметров и характеристик материалов, приборов, схем, устройств и установок различного функционального назначения с использованием ИК-спектроскопии
				Владеть: навыками и реализовывать на практике эффективную методику экспериментального исследования параметров и характеристик материалов, приборов, схем, устройств и установок различного функционального назначения с использованием ИК-спектроскопии
ПК-4	Способен модернизировать существующие и внедрять новые методы измерений параметров наноматериалов и наноструктур	ПК-4.2	Реализует на практике основные методы измерений параметров наноматериалов и наноструктур	Знать: основные методы измерений параметров наноматериалов и наноструктур с использованием ИК-спектроскопии
				Уметь: выбирать на практике основные методы измерений параметров наноматериалов и наноструктур с использованием ИК-спектроскопии
				Владеть: практическими навыками измерений параметров наноматериалов и наноструктур с использованием методов ИК-спектроскопии

Форма промежуточной аттестации Экзамен

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			8 семестр
Аудиторные занятия		72	72
в том числе:	лекции	12	12
	практические		
	лабораторные	24	24
	групповые консультации		
Самостоятельная работа		36	36
Контроль		36	36
Форма промежуточной аттестации – экзамен			
Итого:		108	108

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Основы теории и основные понятия инфракрасной спектроскопии	Основные теоретические понятия и физические процессы, приводящие к возникновению инфракрасных спектров поглощения. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Колебания двухатомных молекул. Классическое и квантовое описание гармонического осциллятора. Частота и амплитуда колебаний. Нулевые колебания, их амплитуда. Собственные функции гармонического осциллятора. Правила отбора по квантовому числу. Вращение двухатомных молекул, частота вращения.
1.2	Колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов	Колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов. Нормальные колебания молекул, частота и форма колебаний. Вековое уравнение. колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов для модельных наноструктур, Фононы в кристаллах. Колебания одномерной двухатомной цепочки. Дисперсия фононов. Плотность фононных состояний. Правила отбора по волновому вектору.
1.3	Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии.	Симметрия колебаний. Понятие симметрии колебаний. Эквивалентные колебательные координаты. Матрицы преобразования координат. Координаты симметрии, их определение. Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии. Анализ колебаний кристаллов кремния. Правила отбора в колебательных спектрах. Математическая формулировка правил отбора. Правила отбора в ИК спектроскопии
1.4	Основные техники инфракрасной спектроскопии	Основные техники инфракрасной спектроскопии, основные компоненты и типы инфракрасных спектрометров, а также методиках получения спектральных характеристик наноматериалов с использованием ИК-спектроскопии Особенности аппаратуры для измерений в инфракрасной области спектра. Приборы с интерференционной и растровой селективной модуляцией светового потока. Непрерывно

		действующие автоматические ИК-анализаторы.
1.5	Анализ и основные характеристики инфракрасных спектров	Анализ и основные характеристики инфракрасных спектров (характеристическая частота, полуширина полосы, интегральная интенсивность). Факторы, влияющие на сдвиг колебаний и интенсивность полос поглощения для различных типов наноматериалов. Колебательные спектры кристаллов с конденсированными анионными мотивами. Связь колебательных спектров минералов с кристаллохимическими факторами. Водородная связь на примере молекул H ₂ O в кристаллах. Типы водородной связи. Частота, интенсивность, ширина линий колебаний O-H связей молекулы воды. Колебательные спектры кристаллов
1.6	Экспериментальных исследований параметров и характеристик	Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур с использованием инфракрасной спектроскопии; Методы колебательной спектроскопии для идентификации функциональных материалов на основе структурно-группового, молекулярного и количественного анализов. Качественный и количественный анализ. Подготовка образцов. Приставки к инфракрасным спектрометрам.
2. Лабораторные работы		
2.1	Основы теории и основные понятие инфракрасной спектроскопии	Лабораторная работа 1. Методы обработки спектров. Расчет основных характеристик спектров.
2.2	Колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов	Лабораторная работа 2. Отнесение полос в спектрах молекул к определенным типам переходов
2.3	Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии.	Лабораторная работа 3. Проведение качественного анализа инфракрасных спектров.
2.4	Основные техники инфракрасной спектроскопии	Лабораторная работа 4. Пробоподготовка в ИК Спектрометрии. Количественный анализ многокомпонентных структур
2.5	Анализ и основные характеристики инфракрасных спектров	Лабораторная работа 5 Проверка закона Бугера-Ламберта-Бера.
2.6	Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур	Лабораторная работа 6. Исследование наноструктур. Определение степени кристалличности наноматериалов.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)						
		Лекции	Практические	Лабораторные	Групповые консультации	Самостоятельная работа	Контроль	Всего
1	Основы теории и основные понятие инфракрасной спектроскопии	2		4		4	6	12
2	Колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов	2		4		4	6	16

3	Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии.	2		4		8	6	20
4	Основные техники инфракрасной спектроскопии	2		4		8	6	20
5	Анализ и основные характеристики инфракрасных спектров	2		4		4	6	18
6	Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур	2		6		8	6	22
	Итого:	12		24		36	36	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Изучение дисциплины «ИК-спектроскопия» предусматривает осуществление учебной деятельности состоящей из двух частей: обучения студентов преподавателем и самостоятельной учебной деятельности студентов по изучению дисциплины.

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии. По образовательным формам: лекции; лабораторные работы; индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: объяснительно-иллюстративные (объяснение, показ–демонстрация учебного материала и др.); активные (анализ учебной и научной литературы, составление схем и др.) и интерактивные, в том числе и групповые (взаимное обучение в форме подготовки и обсуждения докладов); информационные; компьютерные; мультимедийные (работа с сайтами академических структур, научно-исследовательских организаций, электронных библиотек и др., разработка презентаций, сообщений и докладов, работа с электронными обучающими программами и т.п.).

Подготовка к лекциям является одним из видов самостоятельной работы студентов-магистров. Студентам, чтобы хорошо овладеть учебным материалом, необходимо выработать навыки правильной и планомерной работы. Перед началом лекционных занятий надо просмотреть все, что было сделано в предыдущий раз. Это позволит сосредоточить внимание и восстановить в памяти уже имеющиеся знания по данному предмету. Кроме того, такой метод поможет лучше запомнить как старое, так и новое, углубит понимание того и другого, так как при этом устанавливаются связи нового со старым, что является не только обязательным, но и основным условием глубокого овладения материалом. Чем детальнее изучаемое ассоциируется с известным ранее, тем прочнее сохраняется в памяти и быстрее вспомнить, когда требуется.

Приступая к изучению нового материала, необходимо сосредоточиться, т.е. сконцентрировать внимание и не отвлекаться от выполняемой работы, помня, что желание запомнить является гарантией успешной работы, отсутствие же воли к запоминанию снижает эффект восприятия.

Следует помнить о том, что через лекцию передается не только систематизированный теоретический материал, но и постигается методика научного исследования и умение самостоятельно работать, анализировать различного рода явления.

Записывать на лекции необходимо главное, не стремясь зафиксировать все слово в слово. Выбрать же главное без понимания предмета невозможно. Наличие собственного конспекта лекций позволяет еще раз ознакомиться, продумать, разобраться в новом материале, так как недостаточно хорошо понятые во время лекции положения могут быть восстановлены в памяти, сопоставлены с другими, додуманы, дополнены, уяснены и расширены с помощью учебной литературы. Записи являются пособиями для повторения, дают возможность охватить содержание лекции и всего курса в целом.

При этом хорошо овладеть содержанием лекции – это:

- знать тему;
- понимать значение и важность ее в данном курсе;
- четко представлять план;
- уметь выделить основное, главное;
- усвоить значение примеров и иллюстраций;
- связать вновь полученные сведения о предмете или явлении с уже имеющимися;
- представлять возможность и необходимость применения полученных сведений.

Существует несколько общих правил работы на лекции:

- лекции по каждому предмету записывать удобнее в отдельных тетрадях, оставляя широкие поля для пометок;

- к прослушиванию лекций следует готовиться, что позволит в процессе лекции отделить главное от второстепенного;

- лекции необходимо записывать с самого начала, так как оно часто бывает ключом ко всей теме;

- так как дословно записать лекцию невозможно, то необходимо в конспекте отражать: формулы, определения, схемы, трудные места, мысли, примеры, факты и положения от которых зависит понимание главного, новое и незнакомое, неопубликованные данные, материал отсутствующий в учебниках и т.п.;

- записывать надо сжато;

- во время лекции важно непрерывно сохранять рабочую установку, умственную активность.

Изучение теоретического материала в данном курсе не ограничивается подготовкой к лекциям и работой на данном виде занятий. Лекционная часть курса органически взаимосвязана с иными видами работ: написанием рефератов, участием в лабораторных работы, подготовкой и сдачей зачета по дисциплине, в структуре которых также большое значение имеет самостоятельная работа студента.

Самостоятельная работа обучающихся наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса и является существенной ее частью, что наиболее ярко представлено в процессе подготовки магистров. Последнее обусловлено тем, что самостоятельная работа предназначена для формирования навыков самостоятельной работы как вообще, так и в учебной, научной деятельности, формирование и развитие способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать проблему, находить конструктивные решения, выход из кризисной ситуации и т.д.

Самостоятельная работа формирует самостоятельность не только как совокупность умений и навыков, но и как черту характера, играющую существенную роль в структуре личности современного специалиста высшей квалификации. Она воспитывает самостоятельность как черту характера. Никакие знания, полученные на уровне пассивного восприятия, не ставшие объектом собственной умственной или лабораторной работы, не могут считаться подлинным достоянием человека.

Давая возможность расширять и обогащать знания, умения по индивидуальным направлениям, самостоятельная работа обучающегося позволяет создать разносторонних специалистов. В процессе самостоятельной работы развивают творческие возможности обучающегося, при этом самостоятельная работа завершает задачи всех видов учебной работы.

Самостоятельная работа - это планируемая работа обучающихся, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Преподаватель, ведущий занятия, организует, направляет самостоятельную работу обучающихся и оказывает им необходимую помощь. Однако самостоятельность обучающихся должна превышать объем работы, контролируемой преподавателем работы, и иметь в своей основе индивидуальную мотивацию обучающегося по получению знаний, необходимых и достаточных для будущей профессиональной деятельности в избранной сфере. Преподаватель при необходимости может оказывать содействие в выработке и коррекции данной мотивации, лежащей в основе построения

самостоятельной деятельности обучающегося по изучению дисциплины, получению необходимых знаний и навыков.

Получение образования предполагает обучение решению задач определенной сферы деятельности. Однако как бы хорошо не обучались обучающиеся способам решения задач в аудитории, сформировать средства практической деятельности не удастся, так как каждый случай практики особый и для его решения следует выработать особый профессиональный стиль мышления.

Основой самостоятельной работы служит научно-теоретический курс, комплекс полученных обучающимся знаний. Основной, наиболее экономичной формой получения и усвоения информации, теоретических знаний в вузе является лекция, позволяющая воспринять значительную сумму основных знаний и потому способствующая повышению продуктивности всех других форм учебного труда.

Результат обучения и самостоятельной работы обучающегося предполагает наличие следующих составляющих:

- понимание методологических основ построения изучаемых знаний;
- выделение главных структур учебного курса;
- формирование средств выражения в данной области;
- построение методик решения задач и ориентации в проблемах (ситуациях).

Самостоятельная работа обучающихся при изучении «ИК-спектроскопия» включает в себя: подготовку и участие в изучении теоретической части курса, выполнение лабораторных работ, подготовку к зачету.

Самостоятельная работа студента при изучении дисциплины «ИК-спектроскопия» включает в себя:

изучение теоретической части курса	– 10 часов
подготовку к лабораторным занятиям	– 8 часов
написание отчетов по лабораторным работам	– 8 часов
подготовку к экзамену	– 10 часов
итого	– 36 часов

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Инфракрасная спектроскопия твердотельных систем пониженной размерности : учебное пособие / А. И. Ефимова, Л. А. Головань, П. К. Кашкаров [и др.]. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 248 с. — ISBN 978-5-8114-2378-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/169252
2.	Лебухов, В. И. Физико-химические методы исследования : учебник / В. И. Лебухов, А. И. Окара, Л. П. Павлюченкова. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 480 с. — ISBN 978-5-8114-1320-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/168467
3.	С Коровкин, М. В. Инфракрасная спектроскопия карбонатных пород и минералов : учебное пособие / М. В. Коровкин, Л. Г. Ананьева. — Томск : ТПУ, 2017. — 87 с. — ISBN 978-5-4387-0758-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/106768

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Спектроскопические методы анализа (молекулярная спектроскопия) : учебное пособие / Г. И. Берестова, И. Н. Коновалова, Н. В. Долгопятова, Н. М. Путинцев. — Мурманск : МГТУ, 2014. — 192 с. — ISBN 978-5-86185-784-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-

	библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/142672
5.	Егоров, А. С. Инфракрасная Фурье-спектроскопия : учебно-методическое пособие / А. С. Егоров. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2012. — 40 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/152922
6.	Бёккер, Ю. Спектроскопия : руководство / Ю. Бёккер. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с. — ISBN 978-5-94836-220-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/73013
7.	Пентин, Ю. А. Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин, Л.В. Вилков. ? 2012. -683 с.
8.	Литвин, Ф.Ф. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Ф.Ф. Литвин, В.Т. Дубровский, Р. А. Хатыпов, К. В. Неверов; Под ред. Ф.Ф.Литвина - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 263 с. http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=444657
9.	Купцов А.Х. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров / А.Х. Купцов, Г.Н. Жижин. - [2-е рус. изд.]. – М.: Техносфера, 2013. – 695 с.
10.	Смит А.Л. Прикладная ИК-спектроскопия: Основы, техника, анализ. применение / А.Л. Смит: пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 327 с
11.	Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Молекулярная спектроскопия / М.А. Ельяшевич. – М.: URS: ЛИБРОКОМ, 2012. – 527 с.
12.	Плиев Т.Н. Молекулярная спектроскопия: в 5-ти т. / Т.Н. Плиев. – Владикавказ: Иростон, 2001.
13.	Кларк, Э. Р. Микроскопические методы исследования материалов / Э. Р. Кларк, К. Н. Эберхард. — Москва : Техносфера, 2007. — 376 с. — ISBN 978-5-94836-121-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/73017
14.	Гржегоржевский, К. В. Основы молекулярной спектроскопии: спектры оптического поглощения и люминесценции, применение в изучении полиоксометаллатных нанокластеров : учебное пособие / К. В. Гржегоржевский, А. А. Остроушко. — Екатеринбург : УрФУ, 2015. — 210 с. — ISBN 978-5-7996-1652-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/98428

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
15.	http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ
16.	http://www.moodle.vsu.ru
17.	https://e.lanbook.com – ЭБС «Лань»
18.	https://biblioclub.ru – ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
19.	www.iprbookshop.ru – ЭБС «IPRbooks»
20.	https://elibrary.ru – Научная электронная библиотека

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
21.	Филимонов, В. Е. Фурье-анализ : учебное пособие / В. Е. Филимонов, А. В. Мороз. — Йошкар-Ола : ПГТУ, 2020. — 78 с. — ISBN 978-5-8158-2155-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/157472
22.	Басалаев, Ю. М. Методы исследования динамики решётки : учебное пособие / Ю. М. Басалаев. — Кемерово : КемГУ, 2019. — 189 с. — ISBN 978-5-8353-2586-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/141568
23.	ИК спектроскопия : учебно-методическое пособие для вузов : [для студ. 4 и 5 к. высш. проф. образования дневного отд-ния хим. фак. специальности 020101 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; [сост.: О.Ф. Стоянова[и др.] .— Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2010 .— 43 с. : ил., табл. <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m10-167.pdf >.
24.	Исследование пористого кремния методом инфракрасной спектроскопии [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие для вузов : / Воронеж. гос. ун-т ; сост. : Ю.А. Юраков, А.С. Леньшин, П.В. Середин .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2014 .— <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m14-11.pdf >.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

В учебном процессе используются следующие образовательные технологии. По образовательным формам: лекции; лабораторные работы, групповые консультации, индивидуальные занятия. По преобладающим методам и приемам обучения: объяснительно-иллюстративные (объяснение, показ–демонстрация учебного материала и др.); активные (анализ учебной и научной литературы, составление схем и др.) и интерактивные, в том числе и групповые (взаимное обучение в форме подготовки и обсуждения докладов); информационные; компьютерные; мультимедийные (работа с сайтами академических структур, научно-исследовательских организаций, электронных библиотек и др., разработка презентаций, сообщений и докладов, работа с электронными обучающими программами и т.п.).

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Лаборатория инфракрасной спектроскопии ЦКПНО ВГУ (к.49) ИК-Фурье спектрометр Vertex-70 - 1 шт; Спектрофотометр LAMBDA_650 - 1 шт;
Совместная лаборатория физики наногетероструктур и полупроводниковых материалов (лаб. 28) Программный пакет Omnic Microsoft Windows 7 (договор 3010-15/207-19 от 30.04.2019);
Лаборатория учебного практикума (ауд 129.) Лабораторный стенд для получения тонких пленок и наноструктур методами химического осаждения из газовой фазы и электрохимическими методами - 1 шт.;
Совместная лаборатория "Электронное строение твердого тела" (лаб. 129) вакуумная технологическая установка для магнетронного и термического нанесения металлических и диэлектрических пленок - 1 шт.; электропечь ПТК-1,4-40 с контролируемой атмосферой и автоматизированным управлением для получения материалов с заданными стехиометрией - 1 шт.;
Совместная лаборатория физики наногетероструктур и полупроводниковых материалов (лаб. 28) Дистиллятор лабораторный АЗ-14 «Я-ФП»-01 – 1 шт.; Центрифуга лабораторная ЦЛн-16 – 1 шт.; Магнитная мешалка с подогревом MagicLAB – US-1500D – 1 шт.; Импедансметр Z-1500J – 1шт.; Диспергатор роторный – Ika-T18D – 1шт.; рН-метр/ионометр ИПЛ 111-1 –1 шт., Печь Nabertherm-LE – 1 шт.; Печь LIOP-LF –1 шт.; Ванна ультразвуковая -СТ431D2 –1шт.;Источник тока GWInstek PSW7 800-2.88 – 1 шт.; Источник тока GWInstek GPR – 30H10D – 1 шт, Лабораторные стенды для импеданс-спектроскопии - LCR-спектрометр Elins-1500 - 1 шт, LCR-спектрометр GWInstek LCR-819 - 1 шт.; Рамановский спектрометр РамМикс 532 - 1 шт.; Установка для измерения параметров полупроводниковых материалов на эффекте Холла HMS-2000 - 1 шт.; Оптический микроскоп-твердомер ПМТ-3 – 1 шт.; Интерферометр МИИ-4 – 1 шт.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется через образовательный портал "Электронный университет ВГУ".

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
-------	--	----------------	-------------------------------------	--------------------

1.	Основы теории и основные понятия инфракрасной спектроскопии	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторная работа 1
2.	Колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторная работа 2
3.	Анализ колебаний молекул и кристаллов по симметрии.	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторные работы 3
4.	Основные техники инфракрасной спектроскопии	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторная работа 4
		ПК-4	ПК-4.2	
5.	Анализ и основные характеристики инфракрасных спектров	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторная работа 5
		ПК-4	ПК-4.2	
6.	Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур	ПК-2	ПК-2.1	Лабораторные работы 6
		ПК-4	ПК-4.2	
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: отчеты о выполнении лабораторных работ.

Перечень тем лабораторных работ

Лабораторная работа 1. Методы обработки спектров. Расчет основных характеристик спектров.

Лабораторная работа 2. Отнесение полос в спектрах молекул к определенным типам переходов

Лабораторная работа 3. Проведение качественного анализа инфракрасных спектров.

Лабораторная работа 4. Пробоподготовка в ИК Спектрометрии. Количественный анализ многокомпонентных структур

Лабораторная работа 5 Проверка закона Бугера-Ламберта-Бера.

Лабораторная работа 6. Исследование наноструктур. Определение степени кристалличности наноматериалов.

Для текущего контроля успеваемости используется устный опрос, отчеты о ходе выполнения лабораторных работ, на основе которых выставляется предварительная оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно/неудовлетворительно*.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала предварительных оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять	Повышенный уровень	<i>Отлично</i>

теоретические знания для выполнения лабораторных работ		
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), допускает незначительные ошибки при выполнении лабораторных работ	Базовый уровень	<i>Хорошо</i>
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен выполнять лабораторные работы	Пороговый уровень	<i>Удовлетворительно</i>
Неудовлетворительное выполнение тестовых заданий. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки при выполнении лабораторных работ	–	<i>Неудовлетворительно</i>

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Перечень вопросов для проведения текущего контроля

Контрольные вопросы и задания для проведения контроля №1:

1. Классический и квантовомеханический подходы к объяснению спектров. Классическое и квантовое описание гармонического осциллятора. Частота и амплитуда колебаний.
2. Нулевые колебания, их амплитуда. Собственные функции гармонического осциллятора.
3. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул.
4. Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул.
5. Правила отбора по квантовому числу. Вращение двухатомных молекул, частота вращения.

Контрольные вопросы и задания для проведения контроля №2:

1. Колебания многоатомных молекул
2. Нормальные колебания молекул, частота и форма колебаний. Вековое уравнение.
3. колебания многоатомных молекул и колебания кристаллов для модельных наноструктур,
4. Фононы в кристаллах. Колебания одномерной двухатомной цепочки. Дисперсия фононов. Плотность фононных состояний. Правила отбора по волновому вектору.
5. Колебательно-вращательный ИК-спектр двухатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.
6. Число нормальных колебаний сложного иона?
7. Типы нормальных колебаний? Их различия по симметрии. Правила отбора.
8. Какие колебания активны в ИК-спектрах?

Контрольные вопросы и задания для проведения контроля №3:

1. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Нормальные и вырожденные колебания. Активность колебаний в ИК-спектрах. Элементы симметрии молекул.
2. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний.
3. ИК-спектроскопия. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. Линейные молекулы и симметричные волчки: параллельный и перпендикулярный колебательные

переходы. Контуры вращательной структуры колебательно-вращательных полос в ИК-спектрах линейных молекул.

4. Колебательный ИК-спектр двухатомных и многоатомных молекул. Фундаментальные, обертоновые, составные частоты и «горячие» полосы.

5. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Вращательная структура ИК-спектров двухатомных и многоатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.

6. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Элементы симметрии молекул. Активность колебаний в ИК-спектрах.

7. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний. Точечные группы. Их классификация.

Контрольные вопросы и задания для проведения рейтинг-контроля 4:

1. Классификация спектров в зависимости от условий получения, природы объекта, типа его энергетических переходов и разрешающей способности спектрального прибора.

2. ИК-спектроскопия. Ближняя, средняя и дальняя ИК-область.

3. Техника эксперимента. Классификация спектрометров. Основные преимущества интерференционных Фурье-спектрометров.

3. ИК-спектроскопия.. Подготовка образцов. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов. Преимущества и недостатки различных способов пробоподготовки.

4. Возможности использования ИК-спектров для идентификации соединений. Групповые частоты.

Контрольные вопросы и задания для проведения контроля №5

5. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: изменения масс, геометрия, колебательное взаимодействие.

6. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: порядок связи, электронные эффекты, ассоциация.

7. Использование спектроскопических методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.

8. Связь колебательных спектров минералов с кристаллохимическими факторами. Водородная связь на примере молекул H_2O в кристаллах.

9. Типы водородной связи. Частота, интенсивность, ширина линий колебаний O-H связей молекулы воды.

8. Каково влияние позиционной группы симметрии сложного иона и фактор-группы кристалла на число полос в ИК-спектре на примере: а) арагонита – кальцита б) оливина в) апатита г) гипса

10. Рассмотреть увеличение числа полос в ИК-спектре при понижении симметрии сложного иона

11. Рассмотреть изменение характера ИК-спектра при переходе от орто- к диорто- силикатам, объяснить появление в спектре полосы vs Si – O – Si колебаний.

12. Как различить по ИК-спектру, содержит ли кристалл молекулярную воду или ионы OH^- ?

13. Как влияет сила водородной связи на положение полос гидроксила?

14. Объяснить появление деформационных колебаний Me - OH в ИК-спектрах кристаллов с сильной ковалентной связью.

15. Каково влияние валентности катиона на положение полос в ИК-спектре (на примере сульфатов, фосфатов, силикатов)?

16. Показать влияние координационного числа на положение полос в ИК-спектре.

Контрольные вопросы и задания для проведения контроля №6

1. Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур с использованием инфракрасной спектроскопии;
2. Методы колебательной спектроскопии для идентификации функциональных материалов на основе структурно-группового, молекулярного и количественного анализов.
3. Качественный и количественный анализ. Подготовка образцов. Приставки к инфракрасным спектрометрам.
4. Внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: агрегатное состояние, растворитель, концентрация, температура.
5. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ и структурного анализа. Особенности использования корреляционных таблиц.
6. Специальные задачи и методы количественного анализа.

Перечень вопросов к экзамену

Контрольные вопросы и задания для проведения промежуточной аттестации:

1. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул. Колебательный ИК- спектр. Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул.
2. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. P-, R-, Q- ветви. Контур вращательной структуры колебательно-вращательных полос.
3. Теоретические основы метода. Многоатомные молекулы. Нормальные и вырожденные колебания. Активность колебаний в ИК-спектрах.
4. Физические процессы, лежащие в основе получения ИК спектров.
5. Число нормальных колебаний, типы нормальных колебаний.
6. Рассмотреть типы симметрии колебаний в точечных группах C_{2v} , D_2 , C_{3v} , D_{2d} , D_{3h} , D_{3d} .
7. Что представляет собой ИК спектр? Каково энергетическое условие Бора?
8. Уравнение Ламберта-Бэра и зачем оно нужно?
9. Что такое эффект Давыдова? Фактор групповой анализ колебаний.
10. Правила отбора для ИК спектров.
11. Правило альтернативного запрета
12. Фундаментальные частоты, обертоны, «горячие полосы». Взаимосвязь колебательно-вращательной структуры ИК-спектров и симметрии многоатомных молекул.
13. Расчет числа внутренних колебаний треугольного иона заданной симметрии в заданной пространственной группе.
14. Расчет числа внутренних колебаний тетраэдрического иона заданной симметрии в заданной пространственной группе.
15. Отличительные черты спектров силикатов с различной степенью конденсации кремнекислородных полиэдров
16. Колебания молекулы воды. Как различить по ИК-спектру, содержит ли кристалл молекулярную воду или ионы OH^- ?
17. От чего зависит положение полос колебаний связей $O-H$ в колебательном спектре. Особенности спектров соединений с сильными водородными связями.
18. С чем связано появление в ИК спектре полос $X-OH$, где X - катион? от чего зависит положение этих полос?
19. Кристаллохимические факторы, влияющие на положение полос в колебательных спектрах минералов.
20. ИК-спектроскопия. Групповые частоты. Внутренние факторы, оказывающие на них влияние.
21. ИК-спектроскопия. Групповые частоты. Внешние факторы, оказывающие на них влияние.

22. Экспериментальных исследований параметров и характеристик наноструктур с использованием инфракрасной спектроскопии;
23. Методы колебательной спектроскопии для идентификации функциональных материалов на основе структурно-группового, молекулярного и количественного анализов.
24. Качественный и количественный анализ. Подготовка образцов. Приставки к инфракрасным спектрометрам.
25. Внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: агрегатное состояние, растворитель, концентрация, температура.
26. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ и структурного анализа. Особенности использования корреляционных таблиц.
27. Специальные задачи и методы количественного анализа.

Описание технологии проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине – зачет с оценкой. В приложение к диплому вносится оценка *отлично/хорошо/удовлетворительно*.

Оценка уровня освоения дисциплины «ИК-спектроскопия» осуществляется по следующим показателям:

- качество и своевременность выполнения лабораторных работ;
- полнота ответов на вопросы контрольно-измерительного материала;
- полнота ответов на дополнительные вопросы.

Критерии оценки освоения дисциплины «ИК-спектроскопия»:

– оценка *отлично* выставляется при полном соответствии работы студента всем вышеуказанным показателям. Соответствует высокому (углубленному) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы полностью, проявляются и используются систематически, в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей повышенный (продвинутый) уровень;

– оценка *хорошо* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует одному из перечисленных показателей или в случае предоставления курсовых работ и отчетов по лабораторным работам позже установленного срока. Соответствует повышенному (продвинутому) уровню сформированности компетенций: компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме. Данный уровень превосходит, по крайней мере, по одному из перечисленных выше показателей пороговый (базовый) уровень;

– оценка *удовлетворительно* выставляется в случае, если работа студента при освоении дисциплины не соответствует любым двум из перечисленных показателей. Соответствует пороговому (базовому) уровню сформированности компетенций: компетенции сформированы в общих чертах, проявляются и используются ситуативно, частично. Данный уровень обязателен для всех осваивающих основную образовательную программу;

– оценка *неудовлетворительно* выставляется в случае несоответствия работы студента всем показателям, его неорганизованности, безответственности и низкого качества работы при выполнении лабораторных работ, предусмотренных программой дисциплины.

Факт невыполнения требований, предъявляемых к студенту при освоении дисциплины «ИК-спектроскопия» и отраженных в вышеперечисленных критериях, фиксируется в ведомости оценкой *неудовлетворительно*.

Если студент не осваивает дисциплину в установленном программой объеме и в сроки, определенные графиком учебного процесса, он не допускается к промежуточной аттестации по данному виду учебной работы.