

**Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М. В. Ломоносова
Протокол № 4 от 3 июня 2015 г.**

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Molecular Spectroscopy and Dynamics (Молекулярная спектроскопия и динамика)**
Курс посвящен рассмотрению и обсуждению базовых теоретических концепций в молекулярной спектроскопии и динамике атомно-молекулярных систем. Обсуждаются вероятности переходов различных типов, правила отбора, применение теории групп в спектроскопии, а также динамический подход для описания спектров молекулярных систем. В курсе также рассматриваются спектральные проявления различных взаимодействий между колебательными степенями свободы, колебательно-вращательное и электронно-колебательное взаимодействие. Обсуждаются различные методы в спектроскопии, в том числе спектроскопия действия, фотоэлектронная спектроскопия, импульсная спектроскопия с временным разрешением. Курс читается на английском языке и предназначен для аспирантов, специализирующихся в области физической и квантовой химии. Материал курса будет полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальностям 02.00.04 – физическая химия, а также 02.00.17 – математическая и квантовая химия.
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки: **04.06.01 Химические науки**. Направленность (профиль) **Физическая химия, Математическая и квантовая химия**

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

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

Компетенция	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>УК-2. Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки</p>	<p>УК-2.1 разрабатывает и содержательно аргументирует предлагаемые способы решения научно-исследовательских задач на основе методологии научного познания УК-2.3 анализирует основные мировоззренческие и методологические проблемы, в т.ч. междисциплинарного характера, возникающие в науке на современном этапе ее развития</p>	<p>Знает методы научно-исследовательской деятельности и историческую эволюцию применяемых концепций</p>
<p>ОПК-1 Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>ОПК-1.1 систематизирует знания в выбранной области химии или смежных областях науки;</p>	<p>Умеет выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>
<p>СПК-2 Способен проводить расчетно-теоретические исследования физико-химической направленности с использованием современного программного обеспечения</p>	<p>СПК-2.1 предлагает расчетно-теоретические методы исследования физико-химических характеристик систем разной природы СПК-2.2 применяет современные методы компьютерного моделирования для решения задач физико-химической направленности</p>	<p>Знает: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей, используемых в молекулярной спектроскопии Умеет выбрать технологию моделирования спектров молекулярных систем и средства</p>

		выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов; интерпретировать экспериментальные спектры молекулярных систем Умеет оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных в области молекулярной спектроскопии
--	--	--

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 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 50 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов групповые консультации, 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 58 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

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

Для успешного освоения дисциплины и формирования компетенций слушателями в специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физика», «Физическая химия», «Классическая механика», «Квантовая механика», «Квантовая химия», «Строение молекул».

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. Polyatomic molecules and symmetries -a sprint through Group Theory	13	6		1			7	6		6
Тема 2. Spectroscopic transitions: gross-selections rules in absorption, emission, and Raman processes.	9	4		1			5	4		4
Тема 3. Molecular rotation and selection rules; centrifugal distortion and nuclear statistics	9	4		1			5	4		4
Тема 4. Polyatomic molecular vibrations and selection rules within and beyond the harmonic and rigid rotor approximations	10	5		1			6	4		4
Тема 5. Molecular electronic transitions; curve crossings and non-adiabatic couplings	11	5		1			6	5		5
Тема 6. Ligand field theory and Jahn	10	4		1			5	5		5

Teller distortion										
Тема 7. Wavepacket dynamics and time-resolved ultrafast spectroscopy	15	4		1			5		10	10
Тема 8. Spectroscopy through a time-dependent formalism	15	4		1			5		10	10
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	16					6	6			10
Итого	108	36	0	8	0	6	50	28	20	58

9. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций.

10. Оценочные материалы для проверки результатов обучения по дисциплине (модулю)

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 \ 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 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

Типовые задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, методические материалы, определяющие процедуры оценивания приведены в разделе **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения.**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знает: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей, используемых в молекулярной спектроскопии	устный опрос на зачете
Умеет: выбрать технологию моделирования спектров молекулярных систем и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов; интерпретировать экспериментальные спектры молекулярных систем	устный опрос на зачете
Умеет использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений	устный опрос на зачете
Умеет оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных в области молекулярной спектроскопии	устный опрос на зачете

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

12. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Bernath, P. F. Spectra of Atoms and Molecules. New York, NY: Oxford University Press, 1995.
2. Wilson, E. B., J. C. Decius, and P. C. Cross. Molecular Vibrations. New York, NY: McGraw-Hill, 1955.
3. P. Atkins, R. Friedman. Molecular quantum mechanics. Oxford university press, 2005

Дополнительная литература

1. Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. М.: Мир, Научный мир. 2004. 764 с.
2. W.H. Flygare, "Molecular structure and dynamics", New Jersey: Prentice Hall. 1978.
3. Domcke W., Yarkony D. R., and Köppel, H. (eds.) Conical Intersections: Theory, Computation and Experiment, vol. 17 of Advanced Series in Physical Chemistry (World Scientific, Singapore, 2011).

4. Malhado J.P., Bearpark M.J., Hynes J.T. Non-adiabatic dynamics close to conical intersections and the surface hopping perspective, *Frontiers in Chemistry*, 2014, Vol. 2, article 97.
5. Bochenkova A.V., Andersen L.H. Photo-initiated dynamics and spectroscopy of the deprotonated Green Fluorescent Protein chromophore, in *Physical Chemistry in Action: Photophysics of Ionic Biochromophores* (Eds: S. Brondsted Nielsen, J. A. Wyer), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013, pp. 67-103.

13. Язык преподавания – английский

14. Преподаватели:

Боченкова Анастасия Владимировна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ; e-mail: bochenkova@phys.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы заданий для промежуточного контроля усвоения материала (зачета в форме представления устного доклада):

1. The Born Oppenheimer approximation, curve crossings, and non-adiabatic couplings
2. Symmetry-adapted linear combinations in molecular orbital theory of polyatomic molecules
3. Ligand field theory
4. Huckel theory: conjugated π -systems (e.g. benzene)
5. Group theory and molecular vibrations
6. Fermi resonance
7. Coriolis effects
8. Inversion doubling
9. Electronic transitions and symmetry
10. Pure rotational selection rules

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится в форме доклада (презентации) по одной из предлагаемых тем с последующим обсуждением.