МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики твердого тіла

Затверджено на засіданні
кафедри фізики твердого тіла
фізичного факультету
Львівського національного
університету імені Івана Франка
(протокол № 1 від 25 серпня 2023 р.)

Завідувач кафедри

Володимир КАПУСТЯНИК

Силабус
з навчальної дисципліни «Оптична спектроскопія», що викладається в межах ОНП «Теоретична фізика та астрофізика» другого (магістерського) рівня вищої освіти для здобувачів зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Львів 2023

Назва дисципліни	**Оптична спектроскопія**
Адреса викладання курсу	Вул. Драгоманова 50, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра фізики твердого тіла
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки / 104 Фізика та астрономія
Викладачі курсу	завідувач кафедри фізики твердого тіла, професор, д.ф.-м.н Капустяник Володимир Богданович
Контактна інформація викладачів	volodymyr.kapustianyk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/kapustyanyk-volodymyr-bohdanovych
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та практичних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/optychna-spektroskopiya-fizyka
Інформація про курс	Дисципліна «Оптична спектроскопія» є вибірковою дисципліною зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі 5 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація курсу	Курс «Оптичної спектроскопії» є одним з найважливіших розділів фізики. В курсі розглядається теорія атомних спектрів та спектрів речовин у конденсованому стані, а також принцип роботи і характеристики різних типів спектральних приладів. Значне місце в курсі відведене теоретичним моделям, які використовують для аналізу оптичних спектрів, а також практичному застосуванню різних варіантів оптичної спектроскопії в різноманітних сферах діяльності людини – науці, зокрема, в астрономії, астрофізиці і фізиці твердого тіла, виробництві, медицині, судовій, митній, екологічній експертизі тощо.
Мета та цілі курсу	**Мета курсу:** ознайомити студентів з теоретичними основами, закономірностями та поняттями спектрального аналізу та спектроскопії речовин в конденсованому стані, ознайомити з різними оптико-спектральними методами дослідження елементного хімічного складу, молекулярної і кристалічної структури різних речовин, а також відповідними теоретичними моделями для аналізу енергетичної структури досліджуваних об’єктів. **Основні цілі курсу:** а) розглянути основні поняття і теоретичні основи оптичної спектроскопії; б) розширити науковий світогляд студентів; в) виробити навички до самостійної роботи з вирішення як наукових, так і прикладних задач із застосуванням оптико-спектральних методів.
Література для вивчення дисципліни	**Базова:** 1. В. Капустяник, В. Мокрий. Прикладна спектроскопія.-Л.:Вид. центр ЛНУ ім. І. Франка.- 2009.-305 с. 2. A.B.P. Lever. Inorganic Electronic Spectroscopy. Amsterdam.:Elsevier.- 1987.- 407 p. 3. Ю.М. Буравльов, І.А. Грікіт та ін. Методи спектрального аналізу металів и сплавів.- К.:Техніка.-1988.-215 с. 4. K. Nakamoto. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. New Jersey.- 2009.- 415 p. 5. Стадник В.Й., Капустяник В.Б. Фізика діелектриків. – Львів : Вид. ЛНУ імені Івана Франка, 2020. – 336 с.

	Допоміжна: 1. В.Б. Капустяник. Фізика фероїків з органічним катіоном.-Л.: Вид. центр ЛНУ ім. І.Франка.-2006.- 439 с. 2. В. Капустяник, В. Мокрий. Оптико-спектральні методи в науково-технічній експертизі. Практикум.-Л.:Вид. центр ЛНУ ім. І.Франка.-2004.-207 с. 3. Капустяник В. Б. Багатофункціональні матеріали на основі фероїків / В. Б. Капустяник, Ю. В. Чорній – Кишинів: Globe Edit, 2022. – 202, ISBN 978-620-0-63562-4. **Інформаційні ресурси:** 1. Eric Weisstein's World of Physics http://scienceworld.wolfram.com/physics/ 2. Wikipedia. http://www.wikipedia.org 3. http://www.lbl.gov/abc/Contents.html#experiment
Тривалість курсу	1 семестр
Обсяг курсу	150 годин, з яких 48 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 32 годин лабораторних занять, та 102 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення цього курсу студент буде **знати**: - основні теоретичні питання, викладені в лекційному курсі; - мати уяву про сучасний стан знань щодо електронної структури атомів і її зв'язку з оптико-спектральними властивостями. **вміти**: використовувати отримані знання на практиці при розв'язанні задач з визначення елементного хімічного складу різних речовин та об'єктів, зокрема, в галузі астрономії і астрофізики, а також вивчення молекулярної і кристалічної структури та аналізу різних фізико-хімічних процесів, які в них відбуваються, із застосуванням методів оптичної спектроскопії.
Ключові слова	Оптична спектроскопія, інфрачервоні спектри, комбінаційне розсіювання світла, спектрометр, спектральний аналіз, атомно-абсорбційний аналіз, теорія груп, фактор-груповий аналіз
Формат курсу	Очний: проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у таблицях нижче
Підсумковий контроль, форма	Залік у 3 семестрі
Пререквізити	Вивчення курсу «Оптичної спектроскопії» ґрунтується на знаннях студентів, одержаних при вивченні загальних та спеціальних дисциплін: «Електрика і магнетизм», «Молекулярна фізика», «Оптика», «Атомна і ядерна фізика», «Квантова механіка», «Фізика твердого тіла», «Фізика і техніка низьких температур», «Програмування і математичне моделювання», «Математичний аналіз», «Диференціальні рівняння», а також низки спецкурсів вільного вибору, в яких розглядаються проблеми, пов'язані з оптичною спектроскопією.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Використовуються такі методи навчання: а) словесні – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт; б) наочні – ілюстрування лекційного матеріалу презентаціями, які включають в себе таблиці, схеми та графіки; в) лабораторні – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об'єктів.

Необхідне обладнання	Персональні комп'ютери, операційні системи (Windows, Linux), програмний пакет для обробки даних абсорбційних спектрів "CrysTool", створений на кафедрі фізики твердого тіла, загальновживані комп'ютерні програми, зокрема, програмне забезпечення для обробки та візуалізації результатів вимірювань (MS Office 365 Excel, корпоративна ліцензія ЛНУ імені Івана Франка), комп'ютерний проектор, лабораторне обладнання: комп'ютеризовані установки для вимірювання абсорбційних спектрів та спектрів фото- і рентгенолюмінесценції, спектрометр AvaSpec з ПЗЗ детектором – 2048L.
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за таким співвідношенням: • лабораторні заняття: 40% семестрової оцінки; максимальна кількість балів – 40; • контрольна робота і колоквіум: 60% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів – 60. Контроль засвоєння матеріалу включає поточний контроль (контрольна робота за першим змістовим модулем – 20 балів і колоквіум за другим змістовим модулем – 40 балів), оцінку відповідей та роботи на лабораторних заняттях (8 лаб. робіт×5 балів = 40 балів). Критерії оцінювання лабораторних робіт: 5 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на високому рівні; 4 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на достатньо високому рівні; 3 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні; 2 б. – студент частково виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні; 1 б. – студент частково виконав завдання і тільки частково володіє матеріалом; 0 б. – невиконання завдання. Контрольна робота – максимально 20 балів: 15–20 б. – студент повністю володіє матеріалом; 10–14 б. – студент достатньо володіє матеріалом; 1–9 б. – студент частково володіє матеріалом; 0 б. – студент не володіє матеріалом. Колоквіум – максимально 40 балів: 30–40 б. студент повністю володіє матеріалом; 20–29 б. студент достатньо володіє матеріалом; 1–19 б. студент частково володіє матеріалом; 0 – б. студент не володіє матеріалом. Сумарна оцінка — 100 балів. Додаткові 5 балів студент може отримати за публікацію статті або особисту участь у науковій конференції за тематикою оптичної спектроскопії за умови, що загальне число набраних балів не перевищуватиме 100 балів. **Академічна доброчесність** здобувачами вищої освіти передбачає самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання. Списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій чи усній роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів обману. **Відвідання занять** є важливою складовою навчання. Очікується, що всі

	студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків, визначених для виконання усіх видів робіт, передбачених курсом. **Література**. Усю література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надано викладачами виключно в освітніх цілях без права її передавання третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих. **Політика виставлення балів**. Враховуються бали, набрані на лабораторних заняттях та поточному тестуванні. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнень на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін. Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу **«Оптична спектроскопія»**

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
***Змістовий модуль 1*. Теоретичні основи спектрального аналізу. Загальна характеристика і класифікація спектральних приладів**				
1-3	**Тема 1. Теоретичні основи спектрального аналізу. Загальні положення** 1. Поняття про види спектрального аналізу. Основні визначення. 2. Характерні особливості та можливості спектрального аналізу. 3. Області використання спектрального аналізу. Застосування спектрального аналізу в астрофізиці. 4. Теоретичні основи спектрального аналізу. Хвильові властивості електронів, квантові числа. 5. Періодична система елементів і атомні спектри. 6. Типи спектрів.	лекції – 3 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1-3 Допоміжна: 2	2,5 тижні
3-5	**Тема 2. Загальна характеристика і класифікація спектральних приладів** 1. Принципова схема спектральних приладів. 2. Основні характеристики спектральних приладів. 3. Класифікація спектральних приладів. 4. Основні типи спектрометрів. Основні вимоги до фотоелектричних спектральних приладів.	лекції – 3 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1-3 Допоміжна: 2	2,5 тижні
***Змістовий модуль 2*. Оптична спектроскопія речовин в конденсованому стані**				
6-9	**Тема 3. Абсорбційна спектроскопія речовин в конденсованому стані**	лекції – 5 год, самостійна	Базова: 1-3,5 Допоміжна: 2,	5 тижнів

	1. Методика дослідження спектрів поглинання конденсованих речовин у видимій та УФ областях. 2. Особливості оптичної електронної спектроскопії речовин в конденсованому стані. 3. Теорія кристалічного поля. Модель нормованих сферичних гармонік. 4. Форма електронних орбіталей для різних електронних станів. 5. Внутрішньоіонні переходи. 6. Спектри перенесення заряду. 7. Енергетичні рівні іонів перехідних металів. 8. Діаграми Сугано-Танабе. Енергетичні рівні в лазерних кристалах. 9. Моделі, що описують форму і поведінку краю поглинання. 10. Електрон- (екситон-) фононна взаємодія. Емпіричне правило Урбаха. 11. Прості хромофорні групи. Стереохімія. 12. Теоретичні моделі, що описують форму та інтенсивність спектральних смуг. 13. Термохромний ефект. Термохромні матеріали.	робота – 10 год.	3	
10-12	**Тема 4. Спектри люмінесценції речовин в конденсованому стані** 1. Фізичні основи люмінесценції. Центри свічення. 2. Види люмінесценції. Флуоресценція. Фосфоресценція. 3. Інформація, яку можна отримати зі спектрів люмінесценції. 4. Параметри люмінесценції. Спектри збудження. 5. Екситонна люмінесценція. 6. Екситони в наноструктурах. 7. Застосування люмінесценції і споріднених явищ в оптоелектроніці.	лекції – 3 год, самостійна робота – 5 год.	Базова: 1,5 Допоміжна: 2, 3	3 тижні
13-16	**Тема 5. Молекулярна спектроскопія** 1. Походження молекулярних спектрів. 2. Спектроскопія КРС і резонансна КР спектроскопія. 3. Коливання багатоатомної молекули. Типи коливань. 4. ІЧ спектроскопія. Особливості експериментального дослідження ІЧ спектрів твердих тіл і розчинів. 5. Методика вимірювання спектрів КРС. Геометрія експерименту. 6. Метод групових частот. Характеристичні коливні частоти функціональних груп. 7. Особливості коливної спектроскопії монокристалів. Фактор-груповий аналіз.	лекції – 3 год, самостійна робота – 5 год.	Базова: 4, 5 Допоміжна: 1-3	3 тижні

Таблиця 2

Теми лабораторних занять

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1	Вступне заняття.	лаборатор. заняття – 2 год	1 тиждень
2	Оцифровування спектрів із застосуванням програмного пакету «Get Data».	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.	1 тиждень
3,4	Отримання і апроксимація спектрів поглинання сполук з мідним хромофором.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 9 год.	2 тижні
5, 6	Отримання та комп'ютерний аналіз похідних спектрів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 9 год.	2 тижні
7, 8	Розрахунок параметрів електронної структури кристалів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 9 год.	2 тижні
9	Дослідження термохромного ефекту в комплексних сполуках.	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 9 год.	1 тиждень
10, 11	Використання спектроскопії КРС для дослідження структури монокристалів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
12, 13	Дослідження температурної еволюції краю власного поглинання фероїків.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 5 год.	2 тижні
14, 15	Вивчення екситонних спектрів збудження і фотолюмінесценції широкозонних напівпровідників.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
16	Заключне заняття.	лаборатор. заняття – 2 год.	1 тиждень