

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



проф. Володимир КАПУСТЯНИК

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

Назва дисципліни	Прикладна 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	Капустяник Володимир Богданович, д.ф.-м.н, професор, завідувач кафедри фізики твердого тіла,
Контактна інформація викладачів	volodymyr.kapustianyk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/kapustyanuk-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/prykladna-spektroskopiya-fizyka
Інформація про курс	«Прикладна 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 «Прикладної 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 практичному застосуванню різних варіантів оптичної спектроскопії в різноманітних сферах діяльності людини – науці, зокрема, в астрофізиці і фізиці твердого тіла, виробництві, медицині, судовій, митній, екологічній експертизі тощо.
Мета та цілі курсу	Мета курсу: ознайомити студентів з основними 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. Основні цілі курсу: а) розглянути основні поняття і теоретичні основи прикладної 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. – 05 с. 2. A.V.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. 6. 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.

	<p>Допоміжна:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. Kapustianyk V. Manifestation of the ferroelastoelectric phase transition in the absorption spectra of $(\text{NH}_4)_2\text{CuCl}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$ crystals / V. Kapustianyk, S. Semak, Yu. Chornii, O. Bovgyra, M. Kovalenko // Physica B: Condensed Matter. – 2022. – V. 639. – P. 413929 (10 pp.). https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.413929 <p>Інформаційні ресурси:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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	<p>В результаті вивчення цього курсу студент буде знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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. <p>вміти:</p> <p>використовувати отримані знання на практиці при розв'язанні задач з визначення елементного хімічного складу, молекулярної і кристалічної структури різних речовин та аналізу різних фізико-хімічних процесів, які в них відбуваються, із застосуванням методів прикладної спектроскопії.</p>
Ключові слова	Прикладна спектроскопія, інфрачервоні спектри, комбінаційне розсіювання світла, спектрометр, спектральний аналіз, атомно-абсорбційний 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 «Прикладної 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, загальнонавчавані 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)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за таким співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лабораторні заняття: 40% семестрової оцінки; максимальна кількість балів – 40; • контрольна робота і колоквиум: 60% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів – 60. <p>Контроль засвоєння матеріалу включає поточний контроль (контрольна робота за першим змістовим модулем – 20 балів і колоквиум за другим змістовим модулем – 40 балів), оцінку відповідей та роботи на лабораторних заняттях (8 лаб. робіт×5 балів = 40 балів).</p> <p>Критерії оцінювання лабораторних робіт:</p> <p>5 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на високому рівні;</p> <p>4 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на достатньо високому рівні;</p> <p>3 б. – студент повністю виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні;</p> <p>2 б. – студент частково виконав завдання і володіє матеріалом на задовільному рівні;</p> <p>1 б. – студент частково виконав завдання і тільки частково володіє матеріалом;</p> <p>0 б. – невиконання завдання.</p> <p>Контрольна робота – максимальна 20 балів:</p> <p>15–20 б. – студент повністю володіє матеріалом;</p> <p>10–14 б. – студент достатньо володіє матеріалом;</p> <p>1–9 б. – студент частково володіє матеріалом;</p> <p>0 б. – студент не володіє матеріалом.</p> <p>Колоквиум – максимальна 40 балів:</p> <p>30–40 б. студент повністю володіє матеріалом;</p> <p>20–29 б. студент достатньо володіє матеріалом;</p> <p>1–19 б. студент частково володіє матеріалом;</p> <p>0 – б. студент не володіє матеріалом.</p> <p>Сумарна оцінка — 100 балів.</p> <p>Додаткові бали можна отримати за результатами неформального та/або інформального навчання по тематиці даного курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання відбувається у відповідності до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання.</p> <p>Додаткові 5 балів студент може отримати за публікацію статті або особисту участь у науковій конференції за тематикою прикладної спектроскопії за умови, що загальне число набраних балів не перевищуватиме 100 балів.</p> <p>Академічна доброчесність здобувачами вищої освіти передбачає</p>

	<p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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 запізнь 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.</p> <p>Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу «Прикладна спектроскопія»

Тиждень	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
Змістовий модуль 1. Елементний спектральний аналіз. Основні характеристики і класифікація спектральних приладів				
1-3	<p>Тема 1. Елементний спектральний аналіз.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Основні види спектрального аналізу. 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: 1,2,3 Допоміжна: 2	2,5 тижні
3-5	<p>Тема 2. Основні характеристики і класифікація спектральних приладів</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Принципова схема спектральних приладів. 2. Основні характеристики спектральних приладів. 3. Класифікація спектральних приладів. 4. Основні типи спектрометрів. 	лекції – 3 год, контрольна робота -1 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1,2,3 Допоміжна: 2	2,5 тижні

	5. Вимоги до фотоелектричних спектральних приладів.			
Змістовий модуль 2. Спектроскопія конденсованого стану				
6-9	Тема 3. Абсорбційна спектроскопія речовин в конденсованому стані 1. Методика дослідження абсорбційних спектрів конденсованих речовин . 2. Особливості оптичної електронної спектроскопії речовин в конденсованому стані. 3. Деякі аспекти теорії кристалічного поля. 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. 9. Енергетичні рівні в лазерних кристалах. 10. Моделі, що описують форму і поведінку краю поглинання. 11. Прості хромофорні групи. Стереохімія. 12. Форма та інтенсивність спектральних смуг. 13. Термохромний ефект. Термохромні матеріали.	лекції – 4 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1,2,3,5 Допоміжна: 2, 3	5 тижнів
10-12	Тема 4. Спектри люмінесценції речовин в конденсованому стані 1. Фізичні основи люмінесценції. Центри свічення. Внутрішньоцентрова і рекомбінаційна люмінесценція. 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. Квантовий розмірний ефект. 7. Застосування люмінесценції і споріднених явищ в оптоелектроніці.	лекції – 3 год, самостійна робота – 5 год.	Базова: 1,6 Допоміжна: 2	3 тижні

13-16	Тема 5. Коливна 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.	лекції – 2 год, колоквіум – 1 год, самостійна робота – 5 год.	Базова: 4, 6 Допоміжна: 1, 2	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	Оцифрування спектрів із застосуванням програмного пакету «Get Data».	лаборатор. заняття – 2 год, самостійна робота – 5 год.	1 тиждень
3,4	Отримання та комп'ютерний аналіз похідних спектрів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 9 год.	2 тижні
5, 6	Отримання і апроксимація спектрів поглинання сполук з мідним хромофором.	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	Дослідження температурної еволюції краю власного поглинання фероїків. монокристалів.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
12, 13	Вивчення екситонних спектрів збудження і фотолюмінесценції широкозонних напівпровідників.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 5 год.	2 тижні
14, 15	Використання спектроскопії КРС для дослідження структури.	лаборатор. заняття – 4 год, самостійна робота – 8 год.	2 тижні
16	Заклучне заняття.	лаборатор. заняття – 2 год.	1 тиждень