

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
КАФЕДРА ОПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА (СИЛЛАБУС)
ПО ПРЕДМЕТУ «ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КП В СПЕКТРОСКОПИИ» ДЛЯ
СТУДЕНТОВ 4-Я КУРСА СПЕЦИАЛЬНОСТИ 31040103-ФИЗИКА
ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА

Количество кредитов 4 (96 ч.)

Лекция- 48ч.

Практ -

Лаборатория -48 ч.

Семестр -8


СИЛЛАБУС

Силлабус (расширенная рабочая программа) составлен на основе государственного стандарта высшего профессионального образования Республики Таджикистан утверждённый Министерством образования и науки Республики Таджикистан пр. №18/74 от 28.12.2017 г. для студентов физического факультета, 4-я курса, спец. 31040103-физика.

Силлабус (расширенная рабочая программа) составил доцент кафедры оптики и спектроскопии, Ходиев М.Х.

Силлабус (расширенная рабочая программа) утверждена на заседании кафедры протокол № 6 от 20.01.2025 г.

Заведующий кафедрой:


Ходиев М.Х.

Утверждена научно-методическим советом физического факультета протокол № 5 от 25_01_2025 г.



Председатель метод совета
физического факультета

Информация о преподавателе (тьюторе) предмета:

Ходиев М.Х.- доцент кафедры оптики и спектроскопии физического факультета

Информация для корреспонденции – г. Душанбе, Таджикский национальный университет, «Студенческий городок», физический факультет.

1. Расписание занятий

Ф.И.О. преподавателя	Аудиторные занятия		Адрес преподавателя
	лекция	практическая лаборатория	
доцент Ходиев М.Х.			ГПУ, кафедра оптики и спектроскопии

РАЗДЕЛ I: ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

1.1. Учебный предмет «Использование КП в спектроскопии» в учебном процессе специальности 31040103-физика физического факультета является обязательным предметом. При ее изучении студенты получают определенные знания об нескольких программах квантово-физических расчетов, их устройстве и принципе работы разные комплекс программы.

1.2. **Краткое описание предмета.** В ходе его преподавания представлена информация о нескольких программах квантово-физических расчетов, их устройстве и принципе работы, о том, как создать в программах структуру вещества или молекулы, оптические и геометрические параметры веществ, как они работают и их применение на практике. Также сравнение рассчитанные результаты, с результатами эксперимента.

1.3. **Цель и задачи предмета.** Расширение понимания учащимися концепций вычислительных программ квантовой физики. Принцип построения их работы. ChemDraw Ultra, Chem 3D Ultra. Основные параметры и характеристики этих программы. Определение структуры, оптических параметров, расчет энергии, межмолекулярной энергии, частоты поглощения, формирование и развитие профессиональных навыков у студента при участии в расчетах и беседах, семинарах, конференциях и симпозиумах, посвященных различным вопросам в области оптики.

В зависимости от цели при изучении предмета «Использование КП в спектроскопии» решаются следующие задачи:

КП в спектроскопия, параметры и основные характеристики методов квантово-химических расчетов и др:

- раскрыть содержание и принцип работы программ, создать структуру различных статей.
- предоставление информации о принципе работы этих программ, определение оптических параметров, электронной плотности и некоторых свойств веществ;
- содействовать связанны с формированием у студента умений и навыков на путях овладения основными законами, относящимися к данным программам;
- формирование у учащегося представления о связи данного предмета с другими естественнонаучными предметами (химия, электроника, экология и др).

1.4. **Предпосылки:** При изучении данного предмета учащиеся опираются на полученные ими знания по следующим предметам, способствующим изучению данного предмета: предметы, освоенные учащимися в период

обучения в образовательном учреждении общего среднего образования: физика, математика, химия.

1.5. Постреквизиты: учащиеся обладают знаниями и навыками в результате изучения одного и того же предмета. мастеринг наука оптика а также па с из себя изготовление о н в течение образования говорит само за себя) : химия, физика молекулярный, электрик а также магнетизм, физик атом а также есть астрофизик атомная спектроскопия, но экология и др.

1.6. Основные требования к разделам предмета и его изучению:

1.6.1. Требования к владению предметом (профессиональные навыки).
В результате изучения предмета студент должен:

- а) знать:**
- содержание, характер, особенности и функции предмета «Использование КП в спектроскопии»;
 - теоретические основы возникновения КП;
 - использования КП в спектроскопии в системе технических наук и др.
 - о необходимости использования КП и их реализации на практике;

б) может:

- способность самостоятельно осваивать новые методы исследования, развивать научно-практический профессионализм своей профессиональной деятельности;

– способность самостоятельно учиться и использовать новые знания и навыки;

– возможность анализа и использования различных источников в спектроскопии;

в) может реализовать на практике:

- подготовка схемы электронный в процессе научного использования КП в спектроскопии;
- получить характеристики и работу программ расчета квантовой физики в области использования КП в спектроскопии;

В зависимости от предмета или аудитории, при изучении предмета наряду с традиционными лекционными занятиями существуют различные виды активного преподавания теоретических вопросов, такие как проблемная лекция, академическая лекция, лекция-дискуссия, лекция с используются паузы (остановки, паузы), коллективная (комплексная) лекция и др.

Формы – лекции, практические слуховые занятия, подготовка докладов к конференции, самостоятельная текущая работа, выполнение условных заданий по каждой теме, выполнение самостоятельной работы, написание конспекта (конспекта).

Методы-решение заданий, подготовка отчетов, выполнение самостоятельных работ, обсуждение, рабочие игры, выполнение контрольных работ и тому подобное.

На практических занятиях рекомендуется использовать набор доступной электронной техники: электронная доска, персональные компьютеры, проекционное оборудование. Основные пояснительные материалы (планы, рисунки, таблицы, графики) должны быть подготовлены заранее для соответствующего использования (дисплеи, диски и т. д.). Определение количества публикаций реальных документов (законов, решений, приказов, уставов, положений, стратегий, концепций, государственных программ и т. д.) выгодно, поскольку они используются всеми учащимися на занятиях одновременно. При проведении опроса на практических занятиях целесообразно использовать комплекс тестов.

«Использование КП в спектроскопии»

Общее количество кредитов 4 (96 часов)

Слуховые лекционно-теоретические занятия - (48 часа)

Сессии лабораторного аудита - (48 часа)

2.2. ОБЩИЙ ПЛАН КАЛЕНДАРЯ ПРЕДМЕТОВ УЧЕБНОГО ПРЕДМЕТА
СОДЕРЖАНИЕ ТЕМЫ

№	Цели	Список тем и сезонов			Дата проведения	Литература					
		часть	лекции	Лекции							
I	1	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13]; A3 [стр. 3-5]; A11 [с. 3-5];	Лабораторная работа	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13]; A11 [с. 10-19];						
						3	Лабораторная работа	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13];			
									3	Лабораторная работа	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13]; A11 [с. 101-119];
II	1	3	A8 [стр. 4-18]; A10 [стр. 124-171];	Основные работы в редакторе GaussView пакета Gaussian09	A8 [стр. 4-18]; A10 [стр. 124-171];						
						3	Лабораторная работа	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13];			
III	1	3	A1 [стр. 64-72]; A3 [стр. 50-52]; A6 [стр. 55-60];	Основные работы в OriginPro 7.5.	A1 [стр. 64-72]; A3 [стр. 50-52]; A6 [стр. 55-60];						
						3	Лабораторная работа	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13];			

IV	2	3	A11 [с. 101-119]; A5 [стр. 24-25];	Расчет нормальных колебательных мод в Gaussian	A11 [с. 101-119]; A5 [стр. 24-25];
V	1	3	A2 [стр. 13-35];	Примеры задания конфигурации молекул в редакторе GaussView	A2 [стр. 13-35];
VI	1	3	A1 [стр. 64-72]; A8 [стр. 4-18]; A10 [стр. 124-171];	Исследование оптических параметров простых молекул в Gauss View	A1 [стр. 64-72]; A8 [стр. 4-18]; A10 [стр. 124-171];
VI	2	3	A2 [стр. 35-64]; A5 [стр. 64-125];	Исследование спектральных параметров молекул в программе Gauss View	A2 [стр. 35-64]; A5 [стр. 64-125];

2.3. СОДЕРЖАНИЕ ПРЕДМЕТОВ И ОТДЕЛЬНЫХ РАЗДЕЛОВ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРЕДМЕТОВ

- Тема 1. Введение. Краткое информация о "Использование КП в спектроскопии"
Тема 2. Изучение принципов работы программы Chem Draw Ultra и Chem 3D Ultra.
Тема 3. Основы работы в редакторе GaussView пакета Gaussian 09
Тема 4. Основы работы в Gausslan.
Тема 5. Основы работы в OriginPro 7.5.
Тема 6. Визуализация молекулярных структур с использованием Chem Draw Ultra и Chem 3D Ultra.
Тема 7. ИК-спектроскопия как метод идентификации молекул
Тема 8. Расчет нормальных колебательных мод в Gausslan
Тема 9. Примеры задания конфигурации молекул в редакторе Gauss View
Тема 10. Определение спектральных параметров сложных молекул в Gauss View
Тема 11. Определение оптических параметров простых молекул в Gauss View
Тема 12. Определение спектральных параметров производных триазолов в программе Gauss View
Тема 13. Исследование ассоциации (димеров) молекул в программе Gauss View
Тема 14. Исследование ассоциации (тримеров) молекул в программе Gauss View
Тема 15. Исследование Н-комплексов 1,2,4-триазол + расворителями в программе Gauss View
Тема 16. Обработка полученных результатов в OriginPro 7.5.

2.3. СОДЕРЖАНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТА

Самостоятельная работа обучающегося - как акт обучающегося в самостоятельном процессе освоения образовательной программы предмета согласно намеченным темам и заданиям, полностью обеспечивается учреждением высшего профессионального образования (факультетом) учебно-методическими литературой и инструкцией. Самостоятельная работа студента в условиях реализации кредитной системы обучения осуществляется в двух формах:

- самостоятельная работа студента под руководством преподавателя (СРСРП);
- самостоятельная студенческая работа (СРС).

2.4. СОДЕРЖАНИЕ СРСРП

Практическая подготовка является одной из форм учебной деятельности студентов, она обеспечивает логическую связь с теоретическим образованием, ориентацию отдельных учебных предметов в направлении практики и полноценную подготовку студентов как специалистов. На практических занятиях студенты изучают правила и методы практического использования теоретически полученных знаний по учебному предмету, развивают навыки и умения решать конкретные задачи на основе полученной научной информации.

Целью СРСРП является развитие у студентов способности к пониманию, творческому и самостоятельному мышлению, при этом в ходе нес происходит закрепление, расширение и разъяснение теоретически полученных знаний, что должно способствовать развитию профессиональных навыков студентов.

Осуществляется самостоятельная работа студента под руководством преподавателя - в виде контрольных заданий, рефератов, комплектов домашних заданий, рефератов, презентаций собранных материалов, защиты курсовых работ (проектов), отчетов по стажировкам и др. оценивается учителем.

VIII	1	Исследование ассоциации (димеров) молекул в программе Gauss View	3	A9 [стр. 80-84]; A10 [стр. 40-65].	
	2	Исследование ассоциации (тримеров) молекул в программе Gauss View	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13]; A3 [стр. 18-27]; A6 [стр. 27]; A8 [стр. 18-22].	
VIII	1	Исследование Н-комплексов 1,2,4-триазол + расворителями в программе Gauss View	3	A2 [стр. 40-41]; A5 [стр. 24-25].	
	2	Обработка полученных результатов в OriginPro 7.5	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13]; A4 [стр. 53-65]; A5 [стр. 72-83].	
		Лабораторная работа	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13].	
		Лабораторная работа	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13].	
		Лабораторная работа	3	A1 [стр. 3-6]; A2 [стр. 8-13].	
			48+48		
			96		

14. Глоссарий терминов
15. Панель меню и панель команд редактора GaussView
16. Настройки параметров расчетов Gaussian 09.

РАЗДЕЛ III: ПОЛИТИКА И ПРОЦЕСС ОЦЕНКИ

Оценка выставляется согласно действующему Положению о кредитной системе обучения. Ежемесячно проводится текущий контроль за участием студентов в лекционных и практических занятиях, активностью в СРСРП, выполнением письменных домашних заданий и заданий по СРС. В конце семестра проводится комплексный экзамен в различных формах (тестовая, устная, письменная и др.).

В конце семестра вы получите общий итоговый балл, который является показателем результатов ваших усилий в течение семестра. Суммарная оценка выставляется на основании оценочной таблицы, определяемой Ученым советом вуза.

Учебная активность студента в каждом туре (каждая неделя: $2,5 + 6 + 4 = 12,5$ балла).
В том числе: 4 балла - за активность на лекционных занятиях;
 6 баллов - за выполненные работы, связанные с СРСРП (семинар, практика и т.д.);
 2,5 балла - за самостоятельную работу (СРС).

Определение рейтинга обучающегося в еднорной аттестации, экзамене по учебному предмету также осуществляется на основании требований балльно-рейтинговой системы СРСРП.

Суммарная аттестация, экзамен по предмету образования принимаются и проводятся в форме зачетной или устной. Объем тестовой анкеты при комплексной аттестации, экзамене по учебному предмету равен 25 вопросам. Меньше этого допускается по учебным предметам точных наук.

За каждый правильный ответ присваивается 4 балла. Если в тесте менее 25 вопросов, фиксированная оценка должна быть равна 100.

Баллы, полученные обучающимся при приеме итоговой аттестации, экзамене по учебному предмету, учитываются как сумма баллов за зачет. Рейтинговые баллы, полученные студентом на комплексной аттестации, экзамене по учебному предмету, прибавляются к баллам, набранным в течение семестра.

Оценка, присваиваемая предмету, представляет собой сумму баллов, полученных в течение недели, и результаты итогового экзамена. Очки начисляются следующим образом:

Нет	ТИП КОНТРОЛЬ	НЕДЕЛИ И МИНИМАЛЬНОЕ КОЛИЧЕСТВО ШКОЛ										ИЖ	Σ точки				
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10						
1	За активность на лекциях	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	64

1. Программный комплекс Gaussiam03
2. Редактор GaussView
3. Построение молекул с использованием библиотек редактора GaussView
4. Примеры задания конфигурации молекул в редакторе GaussView
5. Основные методы расчета молекулярных структур
6. Неэмпирические методы расчета
7. Метод Хартри-Фока Метод теории функционала плотности
8. Основные квантово- механические базисы
9. Использование Gaussian Calculation Setup для установки параметров расчетов
10. Визуализация электронной структуры атома кислорода
11. Расчет равновесного расстояния молекулы кислорода ИК-спектроскопия как метод идентификации молекул
12. Колебательный спектр двухатомной молекулы
13. Колебания многоатомных молекул
14. Глоссарий терминов
15. Панель меню и панель команд редактора GaussView
16. Настройки параметров расчетов Gaussian03.

2.5. Краткое описание заданий для самостоятельной работы учащихся (СРС)

Самостоятельная работа студента (СРС) представляет собой активный и целенаправленный способ приобретения знаний, развития его продуктивных умений и навыков без активного участия в этом процессе преподавателя. Все виды самостоятельной работы студентов являются обязательными и контролируются. Самостоятельная работа студента обеспечивает подготовку студента к текущим урокам. Результаты самостоятельной работы студента выражаются в активном участии в лекционно-теоретических и практических занятиях, семинарах, лабораторных работах и едиче зачетных и других форм. Оценка, полученная в результате самостоятельной работы студентов, является основанием для общей оценки усвоения ими учебных предметов. Подведение итогов и оценка самостоятельной работы студента проводится периодически в присутствии всех студентов академической группы. Результаты самостоятельной работы студента учитываются при проведении итоговой аттестации по учебному предмету.

Способы выполнения самостоятельной работы студента на основе образовательных программ предмета «Применение КП в спектроскопии» и учебного плана данной специальности устанавливаются следующим образом:

1. Программный комплекс Gaussiam03
2. Редактор GaussView
3. Построение молекул с использованием библиотек редактора GaussView
4. Примеры задания конфигурации молекул в редакторе GaussView
5. Основные методы расчета молекулярных структур
6. Неэмпирические методы расчета
7. Метод Хартри-Фока Метод теории функционала плотности
8. Основные квантово- механические базисы
9. Использование Gaussian Calculation Setup для установки параметров расчетов
10. Визуализация электронной структуры атома кислорода
11. Расчет равновесного расстояния молекулы кислорода ИК-спектроскопия как метод идентификации молекул
12. Колебательный спектр двухатомной молекулы
13. Колебания многоатомных молекул

