ІНСТИТУТ ГЕОХІМІЇ, МІНЕРАЛОГІЇ ТА РУДОУТВОРЕННЯ
ім. М.П. СЕМЕНЕНКА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

Затверджую
директор ІГМР НАН України
академік НАН України
_____ О.М. Пономаренко
« 29 » 01 2025 р.

Схвалено
Вченою радою ІГМР НАН України
Протокол № 1 від « 28 » 01 2025 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

2.1.3. Спекторскопія мінералів
з спеціальності підготовки аспірантів

Е4 «Науки про Землю»
Форма навчання: очна
Рівень підготовки: третій (освітньо-науковий)
Термін навчання: 2 рік навчання (4 семестр)

Укладач програми
Доктор геол.-мін. наук_____М.М. Таран

Київ – 2025 р.

ВСТУП

Програма складена відповідно до навчального плану ІГМР НАН України. Дисципліна відноситься до вибіркових компонент плану навчального процесу.

Викладається у четвертому семестрі другого року навчання в обсязі 4 кредити ЄКТС (120 год). Зокрема: лекції 40 год, практичні (семінари) – 30 год, самостійна робота - 50 год. Підсумковий контроль – диференційований залік.

Освоєння дисципліни **«Спектроскопія мінералів»** на сучасному рівні необхідне для отримання базових знань з основ мінералогії і кристалографії, сучасних уявлень про будову кристалічної структури мінералів і новітніх методів вивчення її фізичних властивостей як доповнення і розширення до «традиційних» методів мінералогії.

1. Цілі та завдання дисципліни, її місце в системі підготовки аспірантів, вимоги до рівня засвоєння змісту дисципліни

1.1. Цілі і завдання вивчення дисципліни

Мета вивчення дисципліни – формування у аспірантів поглиблених професійних знань зі спектроскопічних методів дослідження кристалічної речовини.

Завдання дисципліни:

- Ознайомити аспірантів з основними спектроскопічними методами дослідження мінералів.
- Підготувати аспірантів до застосування отриманих знань при проведені досліджень в рамках підготовки своєї дисертаційної роботи.

1.2. Вимоги до рівня підготовки аспірантів, які завершили вивчання даної дисципліни.

Аспіранти, які завершили вивчення даної дисципліни, повинні:

- **Мати уявлення**: про основні теорії електронної будови твердого тіла – зонної теорії, теорії кристалічного поля і теорії молекулярних орбіталей.
- **Знати:** мати знання про існуючі спектроскопічні методи вивчення кристалічної структури і фізичних властивостей мінералів.
- **Вміти:** свідомо використовувати спектроскопічні методи в своїй роботі над дисертацією.

1.3. Зв'язок з попередніми дисциплінами

Курс передбачає наявність у аспірантів знань з загальної геології, геохімії, мінералогії та петрографії в обсязі програми вищої професійної освіти.

1.4. Зв'язок з подальшими дисциплінами

Знання та навички, отримані аспірантами при вивченні даного курсу, необхідні для підготовки і написання дисертації за спеціальністю 103 «Науки про Землю»

2. Зміст дисципліни

2.1. Обсяг дисципліни, види навчальної роботи (у годинах)

Вид учбової роботи	Обсяг годин
Трудомісткість вивчення дисципліни	120
Обов’язкова аудиторна учбова нагрузка (всього)	70
Лекції (всього)	40
Практичні/семінари (всього)	30
Самостійна робота аспіранта (всього)	50

2.2.Розподіл дисципліни і види занять (у годинах)

№ з/п	Назва розділу дисципліни	Обсяг годин		
		лекції	семі-нари	самост. робота
1	Розділ 1. Квантова теорія і теорія атомів.	5	4	7
2	Розділ 2. Теорія кристалічного поля.	5	4	7
3	Розділ 3. Теорія молекулярних орбіталей	5	4	6
4	Розділ 4. Зонна теорія	5	4	7
5	Розділ 5. Оптична спектроскопія мінералів	5	4	6
6	Розділ 6. Інфрачервона і раманівська спектроскопія мінералів	5	4	4
7.	Розділ 7. ЕПР-спектроскопія	5	2	7
8	Розділ 8. Ефект Мессбауера	5	4	6
ВСЬОГО:		**40**	**30**	**50**

2.3. Лекційні та семінарські заняття, їх тематика та обсяг

№	Назва	Обсяг навчальних занять (год.)	
		Лекції	Семінари
Розділ 1. Квантова теорія і теорія атомів			
1	Начала квантової механіки.	2	2
2	Рівняння Шредингера і хвильові функції електрона. Атомні орбіталі і квантові числа електрона. Електронні конфігурації. Періодична система елементів. Перехідні метали.	3	2
Розділ 2. Теорія кристалічного поля			
3	Симетрія кристалічного поля і ефект кристалічного поля на електронні терми і орбіталі атомів і іонів. Слабке, середнє і сильне кристалічне поле.	2	2
4	Елементи теорії груп. Правила відбору.	3	2
Розділ 3. Теорія молекулярних орбіталей			
5	Теорія валентних зв’язків і теорія молекулярних орбіталей. Зв’язуючі і розпушуючі орбіталі.	2	2
6	Атом водню. Хімічний зв’язок. Ковалентні і іонні зв’язки. Гібридизація. Стабільні молекули.	3	2
Розділ 4. Зонна теорія			
7	Походження енергетичних зон в кристалах. Валентні зони, зони провідності і заборонені зони. Міжзонні електронні переходи. Метали, діелектрики і напівпровідники в зонній теорії.	2	2
8	Оптичні спектри поглинання і відбиття рудних мінералів.	3	2
Розділ 5. Оптична спектроскопія мінералів			
9	Параметри оптичних спектрів поглинання, одиниці вимірю-	2	2

	вання в оптичній спектроскопії. Спектри кристалічного поля (*dd*- і *ff*-переходи).		
10	Смуги поглинання електронних переходів з переносом заряду. Спектри радіаційно-дефектних центрів в мінералах	3	2
Розділ 6. Інфрачервона і раманівська спектроскопія мінералів			
11	Коливання атомів і молекул в структурі мінералів. Ближня, середня і дальня ІЧ-області в спектрах поглинання	2	2
12	ІЧ-спектрометри. Принципи дії і конструкції. Правила відбору і типи ІЧ-смуг поглинання. Звичайні і Фур'є ІЧ-спектрометри.	3	2
Розділ 7. ЕПР-спектроскопія			
13	Явище електронного парамагнітного резонансу (ЕПР). Основне рівняння ЕПР. Спектроскопічні характеристики.	2	1
14	Типи парамагнітних центрів в мінералах. Спектри ЕПР, структура спектрів і типи парамагнітної взаємодії в мінералах. Будова і принцип дії ЕПР-спектрометра.	3	1
Розділ 8. Ефект Мессбауера			
15	Ефект Доплера. Мессбауерівські ізотопи. Мессбауерівські спектри ^{57}Fe. Параметри спектрів. Ізомерний зсув і квадрупольне розщеплення.	2	2
16	Вплив валентності, хімічного зв'язку і симетрії лігандного оточення. Спектри ^{57}Fe в мінералах і їхнє інформаційне значення.	3	2
Всього:		**40**	**30**

2.4. Самостійна робота аспірантів, її зміст і обсяг

Зміст самостійної роботи	Обсяг самостійної роботи (години)
Підготовка реферату	15
Підготовка до семінарів	15
Опрацювання матеріалів лекцій	20
Всього:	50

Підтримка самостійної роботи: бази даних та ресурси, доступ до яких забезпечено з мережі ІГМР НАН України.

3. Система поточного та підсумкового контролів результатів навчання, критерії і шкала оцінювання знань

Поточний контроль проводиться у формі активної роботи на лекційних заняттях, виступів на семінарах, підготовки реферату.

Підсумковий контроль передбачає диференційований залік.

Оцінювання окремих видів виконаної аспірантом навчальної роботи і набутих знань та умінь (в балах)

Розділ 1	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	2
Виступи на семінарах	7
Розділ 2	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	2
Виступи на семінарах	7
Розділ 3	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	7
Розділ 4	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	7
Розділ 5	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	8
Розділ 6	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	8
Розділ 7	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	8
Розділ 8	
Вид навчальної роботи	**Максимальна кількість балів**
Активна робота на лекційних заняттях	1
Виступи на семінарах	8
Загальна кількість балів	
Активна робота на лекційних заняттях	10
Виступи на семінарах	60
Реферат	30
Всього:	100

Критерії оцінювання реферату:

- глибоке розкриття проблеми, відображена власна позиція - 25-30 балів
- обґрунтоване розкриття проблеми - 20-25 балів
- тема розкрита неповно - 15-20 балів
- реферат суто компілятивного рівня - 10-15 балів
- розкритий лише окремий аспект - 5-10 бали
- реферат не зарахований - 0-5 балів

Тема реферату надається індивідуально кожному аспіранту викладачем дисципліни.

Аспірант вважається допущеним до підсумкового контролю (диференційованного заліку), якщо він виконав всі види робіт, передбачені навчальним планом. Аспірант допускається до диференційованого заліку за умови наявності 60 балів або більше.

У випадку відсутності аспіранта на диференційованому заліку, який він повинен обов'язково скласти, з будь-яких причин, проти його прізвища у відомості робиться запис «Не з'явився». Питання подальшого проходження аспірантом диференційованого заліку у цих випадках вирішується в установленому порядку.

Шкала оцінювання знань аспірантів на диференційованому заліку

100-бальна шкала	**Оцінка за національною шкалою**	**Визначення**
90 – 100	**відмінно**	**Відмінно** – відмінна відповідь, виконання роботи лише з незначною кількістю помилок
80 – 89	**добре**	**Дуже добре** – вище середнього рівня з кількома помилками
70 – 79		**Добре** – в загальному правильна відповідь, робота з певною кількістю грубих помилок
60 – 69	**задовільно**	**Задовільно** – непогано, але зі великою кількістю недоліків
1 – 59	**незадовільно**	**Незадовільно**

4. Рекомендована література

1. *Марфунин А.С.* Введение в физику минералов. М.: Недра, 1974. - 328 с.
2. *Бальхаузен К.* Введение в теорию поля лигандов. Москва: Мир - 1964. – 360 С.
3. *Абрахам А., Блини Б.* Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Т. 1. – М.: Мир, 1972. – 651 с.
4. *Берсукер И.Б.* Электронное строение и свойства координационных соединений: Введение в теорию. Ленинград: Химия, 1986. - 286 С.
5. *Лоу В.* Парамагнитный резонанс в твердых телах. М.: Из-во Иностранной литературы, 1962. - 242 с.
6. *Нокс Р., Голд М.* Симметрия в твердом теле. М.: Наука, 1970. - 424 с.
7. *Оргел Л.Е*. Введение в химию переходных металлов. - М.: Мир, 1964. – 212 с.
8. *Свиридов Д.Т., Свиридова Р.К., Смирнов Ю.Ф.* Оптические спектры ионов переходных металлов в кристаллах. М.: Наука, 1976. – 267 с.
9. *Урусов В.С.* Энергетическая кристаллохимия. М.: Наука, 1975. - 335 с.
10. *Смит А.* Прикладная ИК-спектроскопия: основы, техника, аналитическое применение. М.: Мир, 1982. — 328 с.
11. *Марфунин А.С.* Спектроскопия, люминесценция и радиационные центры в минералах. М.:Недра,1975.