

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ УГЛЕХИМИИ И ХИМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИУХМ СО РАН)**

**УТВЕРЖДЕНА**

Ученым советом ИУХМ СО РАН  
протокол № от «28» 05 2015 г.  
Председатель Ученого совета,  
директор Исмагилов З.Р.  
2015 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

**учебной дисциплины**

**Физические методы исследования  
структуры и состава соединений**

Направление подготовки: 04.06.01 - химические науки

Направленность: 02.00.04 – физическая химия

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель исследователь

Форма обучения: очная, заочная

Кемерово, 2015

**ЛИСТ**  
**согласования рабочей программы дисциплины (модуля)**

Рабочая программа учебной дисциплины «Физические методы исследования структуры и состава соединений» с учетом ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 - химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30 июля 2014 г. N 869, зарегистрировано в Минюсте Российской Федерации 18 августа 2014 года № 33718.

Рабочая программа рекомендована лабораторией супрамолекулярной химии полимеров

Зав. лабораторий д.х.н. профессор Г.Н. Альтшулер

Составители:

Созинов С.А., руководитель ЦКП КемНЦ СО РАН, к.ф-м.н

## СОДЕРЖАНИЕ

1.	Цели и задачи освоения учебной дисциплины.....	4
2.	Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы.....	4
3.	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине.....	4
4.	Содержание и структура учебной дисциплины .....	5
4.1.	Содержание разделов учебной дисциплины .....	5
4.2.	Распределение часов по семестрам и видам занятий .....	7
4.3.	Лабораторные работы .....	8
4.4.	Практические занятия (семинары) .....	9
4.5.	Самостоятельная работа .....	10
5.	Образовательные технологии .....	11
6.	Материально-техническое обеспечение дисциплины .....	11
7.	Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточных аттестаций.....	12
7.1.	Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине.....	12
7.2.	Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточных аттестаций обучающихся .....	12
7.2.1.	Типовые контрольные задания или иные материалы .....	12
7.3.	Шкала академических оценок освоения дисциплины.....	16
7.4.	Система оценки достижений обучающегося по дисциплине .....	16
8.	Учебно-методическое обеспечение дисциплины.....	16
8.1.	Основная литература .....	16
8.2.	Дополнительная литература.....	15
8.3.	Интернет-ресурсы .....	16
8.4.	Методические указания к практическим работам.....	16
8.4.	Методические указания к видам самостоятельной работы .....	17

## 1. Цели и задачи освоения учебной дисциплины

Целью освоения дисциплины является углубленное изучение теоретических основ и практических возможностей важнейших физических методов исследования химических соединений и процессов.

Задачами дисциплины являются:

- изучение теоретических основ физических методов исследования состава, структуры и свойств вещества;
- знакомство с современным оборудованием для исследования и определения строения молекул;
- обучение приемам экспериментальной деятельности для определения физико-химических величин и структуры вещества, умению интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные.

## 2. Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы

Учебная дисциплина относится к дисциплинам Блока 1 Дисциплины (модули).

Для успешного освоения учебной дисциплины необходимы знания фундаментальных разделов физики и математики, основ пользования вычислительной техникой, умения использовать программное обеспечение компьютеров для математических расчетов и обработки экспериментальных данных, знаний теоретических основ неорганической, органической, физической и аналитической химии, строения вещества.

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

<i>Код компетенции</i>	<b>Результаты освоения дисциплины ООП</b> <i>Содержание компетенций</i>	<b>Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине</b>
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<b>знать:</b> - методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий. <b>уметь:</b> - ставить задачу и выполнять научные исследования при решении химических задач с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств. <b>владеть:</b> методами самостоятельного анализа имеющейся информации.
ПК-3	владение теорией и навыками работы на современной научной аппаратуре при проведении химических экспериментов	<b>знать:</b> теоретических основ физических методов исследования состава, структуры и свойств вещества. <b>уметь:</b> 1. ставить задачу и выбирать

		<p>инструментальный метод для решения конкретных задач по определению состава и структуры вещества;</p> <p>2. умению интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные физико-химических методов анализа вещества.</p> <p><b>владеть:</b></p> <p>навыками решения задач в области исследования состава и структуры химических соединений с применением современных инструментальных методов.</p>
--	--	---

## 4. Содержание и структура учебной дисциплины

### 4.1. Содержание разделов учебной дисциплины

#### Тема 1. Введение в предмет

1.1. Шкала электромагнитного излучения. Физические явления, на которых основаны методы исследования – поглощение излучения, испускание, рассеивание, отражение, преломление и другие.

1.2. Краткая история развития методов, Классификация физических методов по характеру взаимодействия вещества с излучением.

1.3. Общие принципы использования различных методов. Спектральные и не спектральные методы. Понятие спектра.

1.4. Различие возможностей методов в решении исследовательских задач. Прямая и обратная задачи.

#### Тема 2. Электронная спектроскопия сложных молекул.

1.1 Характеристики электронных спектров: энергия перехода, интенсивность, ширина и форма полосы поглощения. Правила отбора.

1.2 Объяснение спектров сложных молекул. С позиции метода МО ЛКАО. Общие принципы метода; классификация МО по симметрии, по характеру связывания атомов. Теоретический расчёт спектра. Сила осциллятора. Отнесение электронных переходов.

1.3 Типы электронных переходов в спектрах органических молекул. Хромофоры и ауксохромы. Обзор спектров различных классов соединений.

1.4 Объяснение спектров комплексных соединений с позиций теории кристаллического поля /ТКП/. Основные положения ТКП. Действие лигандов на энергетические состояния 3d- орбиталей.

1.5 Спектрохимический ряд лигандов. Три типа диаграмм Оргела, примеры их использования. Обзор спектров комплексных соединений 3d – металлов. Сравнение теорий кристаллического поля и МО ЛКАО.

#### Тема 3. Колебательная спектроскопия.

3.1. Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебание гармонического осциллятора с позиции классической механики: вывод уравнения потенциальной кривой, частоты колебания. Силовая постоянная связи.

3.2. Результат квантово-механического рассмотрения: уравнение стационарных состояний; колебательное квантовое число; правило отбора; предполагаемый спектр гармонического осциллятора. Учёт ангармоничности колебаний. Кривая Морзе.

3.3. Основные колебательные переходы и обертона, их интенсивности и энергии. Расчёт постоянной ангармоничности. «Горячие» полосы.

3.4. Колебания многоатомной молекулы. Классификация нормальных колебаний по форме и симметрии. Характеристичность колебаний. Отклонение от характеристичности по частоте - мера изменения свойств данной группы атомов.

3.5. Причины усложнения экспериментальных ИК-спектров – влияние физического состояния образца, растворителя, полиморфизма. Внутри- и межмолекулярных взаимодействий, резонансного взаимодействия колебаний; изотопозамещение.

3.6. Принципиальная схема ИК-спектрофотометра. Приготовление образцов, интерпретация спектров. Дальняя и ближняя ИК-области в химических исследованиях.

3.7. Спектроскопия комбинационного рассеивания света. Схема происхождения спектров КРС. Стоксовы, антистоксовы, релеевские линии. Правила отбора. Правило альтернативного запрета. Степень деполяризации линии в спектре КРС, её зависимость от симметрии молекулы и колебания.

3.8. ИК- и КРС- спектроскопия – взаимно дополняющие методы исследования строения молекул.

#### **Тема 4. Вращательная спектроскопия.**

4.1 Условия применения микроволновой спектроскопии. Модель жёсткого ротатора. Момент инерции.

4.2. Уравнение энергии вращательного уровня. Вращательное квантовое число. Набор энергетических состояний. Правила отбора. Вращательная постоянная. Вид вращательного спектра двухатомной молекулы.

4.3. Нежёсткий ротатор. Постоянная центробежного растяжения, её связь с силовой постоянной связи. Вращательные спектры многоатомных молекул.

4.4. Линейные молекулы. Молекулы типа сферического, симметричного, асимметричного волчка. Расчет энергетических состояний симметричного волчка. Понятие эффекта Штарка.

#### **Тема 5. Колебательно-вращательная спектроскопия.**

5.1. Параллельные и перпендикулярные колебания многоатомных молекул. Колебательно-вращательные уровни, их энергетическая диаграмма.

5.2. Правила отбора. Структура P, Q, R- ветвей в спектрах молекул различной симметрии.

#### **Тема 6. Рефрактометрия.**

6.1. Понятие показателя преломления света. Относительный, абсолютный показатель преломления. Зависимость от плотности, поляризуемости молекулы, от температуры, давления, состава растворов, длины волны света.

6.2. Относительная, средняя, удельная дисперсия. Принципиальная схема рефрактометра типа Аббе. Удельная и молярная рефракции. Групповые, связевые, атомные рефракции, структурные инкременты. Вычисление рефракции по аддитивной схеме.

6.3. Экзальтация молекулярной рефракции. Определение структуры органических соединений по молекулярной рефракции и дисперсии. Вычисление рефракции растворенного вещества.

#### **Тема 7. Спектроскопия в радиочастотной области.**

7.1. Метод электронного парамагнитного резонанса. Спиновый и магнитный моменты электрона. Эффект Зеемана для не спаренного электрона. Элементарный магнитный резонанс. Основное уравнение ЭПР, правила отбора и условия получения спектров ЭПР. Параметры спектров ЭПР.

7.2.Сверхтонкое взаимодействие и его проявление в спектре ЭПР. Приложение метода ЭПР в химии. Идентификация и определение концентрации парамагнитных молекул, изучение механизма и кинетики химических реакций.

7.3.Метод ядерного магнитного резонанса. Физические основы метода. Условие ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие ядер.

7.4.Анализ спектров ЯМР. Протонный магнитный резонанс и его применение в органической химии, достоинства и недостатки метода. ЯМР других магнитных ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР.

#### **Тема 8.** Метод ядерного гамма-резонанса.

Эффект Мессбауэра. Допплеровское уширение линий и энергия отдачи. Получение гамма-резонансных спектров. Возможности применения гамма-резонансной спектроскопии в химии.

#### **Тема 9.** Масс-спектрометрия.

9.1. Физические основы метода. Принципиальная схема масс-спектрометра. Методы ионизации. Типы ионов в масс-спектрах, разделение и регистрация ионов. Ионная область и разрешающая способность масс-спектрометра, применение метода.

9.2.Идентификация веществ. Проблемы расшифровки спектров. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определения потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Количественный анализ, применение ЭВМ.

#### **Тема 10.** Спектроскопия в области рентгеновского излучения.

10.1. Схема возникновения фотоэлектронной эмиссии в результате поглощения вакуумного ультрафиолета или рентгеновского излучения в изолированной молекуле в твердом теле. РФЛА спектроскопия.

10.2. Правила отбора. Возможности УФЭС, РФЭС и РФЛА. Количественный элементный анализ. Химический сдвиг в ФЭС и установление структуры молекул. Особенности эксперимента. Достоинства и недостатки метода.

### **4.2. Распределение часов по семестрам и видам занятий**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 академических часов, в том числе:

Очная форма

№ п.п	Наименование тем	Всего	Контактная работа с преподавателем		Самостоятельная работа аспиранта	Форма текущего контроля
			Лекционные	Практические /семинарские		
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение в предмет.	9	-	2	7	собеседование
2	Электронная спектроскопия сложных молекул.	12	-	6	6	собеседование
3	Колебательная спектроскопия.	12	-	6	6	собеседование
4	Вращательная спектроскопия.	10	-	4	6	собеседование
5	Колебательно-	9	-	2	7	собеседование

	вращательная спектроскопия.					
<b>6</b>	Рефрактометрия.	<b>10</b>	-	<b>4</b>	<b>6</b>	собеседование
<b>7</b>	Спектроскопия в радиочастотной области.	<b>8</b>	-	<b>2</b>	<b>6</b>	собеседование
<b>8</b>	Метод ядерного гамма-резонанса.	<b>9</b>	-	<b>2</b>	<b>7</b>	собеседование
<b>9</b>	Масс-спектрометрия.	<b>10</b>	-	<b>4</b>	<b>6</b>	собеседование
<b>10</b>	Спектроскопия в области рентгеновского излучения.	<b>10</b>	-	<b>4</b>	<b>6</b>	собеседование
	<b>Всего: 108 (3 з.е.)</b>		-	<b>36</b>	<b>63</b>	<b>9 зачет</b>

заочная форма

№ п.п	Наименование тем	Всего	Контактная работа с преподавателем		Самостоятельная работа аспиранта	Форма текущего контроля
			Лекционные	Практические /семинарские		
1	2	3	4	5	6	7
<b>1</b>	Введение в предмет.	9	-	0,5	10	собеседование
<b>2</b>	Электронная спектроскопия сложных молекул.	12	-	0,5	10	собеседование
<b>3</b>	Колебательная спектроскопия.	12	-	1	10	собеседование
<b>4</b>	Вращательная спектроскопия.	10	-	1	10	собеседование
<b>5</b>	Колебательно-вращательная спектроскопия.	9	-	1	10	собеседование
<b>6</b>	Рефрактометрия.	10	-	1	10	собеседование
<b>7</b>	Спектроскопия в радиочастотной области.	8	-	1	10	собеседование
<b>8</b>	Метод ядерного гамма-резонанса.	9	-	1	10	собеседование
<b>9</b>	Масс-спектрометрия.	10	-	1	10	собеседование
<b>10</b>	Спектроскопия в области рентгеновского излучения.	10	-	1	10	собеседование

	ния.					
	<b>Всего: 108</b> <b>(3 з.е.)</b>		-	<b>9</b>	<b>90</b>	<b>9 зачет</b>

### 4.3. Лабораторные работы

\* Учебным планом не предусмотрено

### 4.4. Практические занятия (семинары)

#### Тема 1. Введение в предмет

##### Рассматриваемые вопросы

1.1 Шкала электромагнитного излучения. Физические явления, на которых основаны методы исследования – поглощение излучения, испускание, рассеивание, отражение, преломление и другие.

1.2 Краткая история развития методов, Классификация физических методов по характеру взаимодействия вещества с излучением.

#### Тема 2. Электронная спектроскопия сложных молекул.

##### Рассматриваемые вопросы

2.1 Характеристики электронных спектров: энергия перехода, интенсивность, ширина и форма полосы поглощения. Правила отбора.

2.2 Объяснение спектров сложных молекул. С позиции метода МО ЛКАО. Общие принципы метода; классификация МО по симметрии, по характеру связывания атомов. Теоретический расчёт спектра. Сила осциллятора. Отнесение электронных переходов.

#### Тема 3. Колебательная спектроскопия.

##### Рассматриваемые вопросы

3.1. Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебание гармонического осциллятора с позиции классической механики: вывод уравнения потенциальной кривой, частоты колебания. Силовая постоянная связи.

3.2. Результат квантово-механического рассмотрения: уравнение стационарных состояний; колебательное квантовое число; правило отбора; предполагаемый спектр гармонического осциллятора. Учёт ангармоничности колебаний. Кривая Морзе.

3.3. Основные колебательные переходы и обертона, их интенсивности и энергии. Расчёт постоянной ангармоничности. «Горячие» полосы.

3.8. ИК- и КРС- спектроскопия – взаимно дополняющие методы исследования строения молекул.

#### Тема 4. Вращательная спектроскопия.

##### Рассматриваемые вопросы

4.1 Условия применения микроволновой спектроскопии. Модель жёсткого ротатора. Момент инерции.

4.2. Уравнение энергии вращательного уровня. Вращательное квантовое число. Набор энергетических состояний. Правила отбора. Вращательная постоянная. Вид вращательного спектра двухатомной молекулы.

#### Тема 5. Колебательно-вращательная спектроскопия.

##### Рассматриваемые вопросы

5.1. Параллельные и перпендикулярные колебания многоатомных молекул. Колебательно-вращательные уровни, их энергетическая диаграмма.

## **Тема 6. Рефрактометрия.**

### **Рассматриваемые вопросы**

6.1. Понятие показателя преломления света. Относительный, абсолютный показатель преломления. Зависимость от плотности, поляризуемости молекулы, от температуры, давления, состава растворов, длины волны света.

## **Тема 7. Спектроскопия в радиочастотной области.**

### **Рассматриваемые вопросы**

7.1. Метод электронного парамагнитного резонанса. Спиновый и магнитный моменты электрона. Эффект Зеемана для не спаренного электрона. Элементарный магнитный резонанс. Основное уравнение ЭПР, правила отбора и условия получения спектров ЭПР. Параметры спектров ЭПР.

7.4. Анализ спектров ЯМР. Протонный магнитный резонанс и его применение в органической химии, достоинства и недостатки метода. ЯМР других магнитных ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР.

## **Тема 8. Метод ядерного гамма-резонанса.**

### **Рассматриваемые вопросы**

8.1. Эффект Мессбауэра. Допплеровское уширение линий и энергия отдачи. Получение гамма-резонансных спектров. Возможности применения гамма-резонансной спектроскопии в химии.

## **Тема 9. Масс-спектрометрия.**

### **Рассматриваемые вопросы**

9.1. Физические основы метода. Принципиальная схема масс-спектрометра. Методы ионизации. Типы ионов в масс-спектрах, разделение и регистрация ионов. Ионная область и разрешающая способность масс-спектрометра, применение метода.

## **Тема 10. Спектроскопия в области рентгеновского излучения.**

### **Рассматриваемые вопросы**

10.1. Схема возникновения фотоэлектронной эмиссии в результате поглощения вакуумного ультрафиолета или рентгеновского излучения в изолированной молекуле в твердом теле. РФЛА спектроскопия.

10.2. Правила отбора. Возможности УФЭС, РФЭС и РФЛА. Количественный элементный анализ. Химический сдвиг в ФЭС и установление структуры молекул. Особенности эксперимента. Достоинства и недостатки метода.

### **Литература:**

1. [1,2] (см. п. 8.1).
2. [2] (см. п. 8.1), [1] (см. п. 8.2).
3. . [1, 2] (см. п. 8.1), [2] (см. п. 8.2).
4. [1, 2] (см. п. 8.1).
5. [1, 2] (см. п. 8.1).
6. [2] (см. п. 8.1).
7. [1, 2] (см. п. 8.1), [1] (см. п. 8.3).
8. [2] (см. п. 8.1).
9. [1, 2] (см. п. 8.1).
10. [1, 2] (см. п. 8.1).

## **4.5. Самостоятельная работа**

№ п/п	Наименование видов самостоятельной работы	Трудоемкость (в академических часах)	Методические материалы
1	Освоение и проработка материала по учебной, научной и справочной литературе, самостоятельное изучение следующих тем из представленного в рабочей программе содержания дисциплины: 1.3-1.4, 2.3-2.5, 3.4-3.7, 4.3-4.4, 5.1, 6.2-6.3, 7.2-7.3, 8.1, 9.2, 10.2	63/90	[1,2] (см. п. 8.1), [1,2 -12] (см. п. 8.2), [1] (см. п. 8.3),
<b>Итого</b>		63/90	

## **5. Образовательные технологии**

Для наиболее эффективной реализации компетентностного подхода в рамках учебной дисциплины предусматривается широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерных симуляций, деловых и ролевых игр, разборов конкретных ситуаций, тренингов) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков аспирантов.

Групповая дискуссия – это совместное обсуждение и анализ проблемной ситуации, вопроса или задачи. Групповая дискуссия может быть структурированной (то есть управляемой педагогом с помощью поставленных вопросов или тем для обсуждения) или неструктурированной (ее течение зависит от участников группового обсуждения).

## **6. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Организация располагает материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы обучающихся, предусмотренных учебным планом. Перечень материально-технического обеспечения включает в себя помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, помещения для самостоятельной работы, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Института.

**7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля и промежуточных аттестаций**

**7.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине**

№ п/п	Контролируемые темы дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
1.	Введение в предмет.	ОПК-1: знать, уметь. ПК-3: знать, уметь- 1,	собеседование
2.	Электронная спектроскопия сложных молекул.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
3.	Колебательная спектроскопия.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
4.	Вращательная спектроскопия.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
5.	Колебательно-вращательная спектроскопия.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
6.	Рефрактометрия.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
7.	Спектроскопия в радиочастотной области.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
8.	Метод ядерного гамма-резонанса.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
9.	Масс-спектрометрия.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование
10.	Спектроскопия в области рентгеновского излучения.	ОПК-1: знать, уметь, владеть. ПК-3: знать, уметь- 1, 2; владеть	собеседование

**7.2. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточных аттестаций обучающихся**

**7.2.1. Типовые контрольные задания или иные материалы**

**Электронная спектроскопия**

1. В каких координатах необходимо представить спектр с исчерпывающей информацией?
2. Каковы общие принципы допущения метода МО ЛКАО?
3. Каким образом классифицируются МО?
4. Приведите примеры соединений, в ЭСП которых проявляются бато- и гипсохромное смещения полос?
5. Как с позиции теории МО ЛКАО объяснить концепцию хромофорного и аукохромоного влияния на поглощения излучения?
6. Какие факторы влияют на значение молярного коэффициента экстинкции?
7. Орбитали каких атомов в комплексных соединениях рассматриваются в ТКП? Нарисуйте эти орбитали.
8. Объясните тот факт, что спектр многоатомной молекулы имеет несколько полос, а не одну.
9. Вычислите концентрации компонентов растворов, имея данные о поглощении этих растворов, их компонентов при длинах волн 338 и 368 нм. Толщина кюветы 1 см. Концентрация растворов компонента 1 и компонента 2 одинаковы –  $5,5 \cdot 10^{-5}$  моль/л.

	1	2	3	4	5	комп. 1	комп.2
--	---	---	---	---	---	---------	--------

№ рас- твора							
D <sup>338</sup>	0,529	0,575	0,600	0,624	0,665	0,467	0,732
D <sup>368</sup>	0,708	0,651	0,606	0,561	0,508	0,804	0,409

### Колебательная спектроскопия

1. Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции классической механики?
2. Какие характеристики двухатомной молекулы влияют на чистоту ее колебания? Напишите уравнение этой зависимости.
3. Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
4. Каков результат рассмотрения модели ангармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
5. Предскажите и сравните ИК-спектры гармонического и ангармонического осцилляторов.
6. Справедливо ли утверждение «чем больше частота колебательного перехода, тем больше его интенсивность»?
7. Объясните, почему для молекул Br<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> и других гомоядерных двухатомных молекул не удаётся зарегистрировать ИК- спектр?
8. Какие классификации нормальных колебаний Вам известны? Приведите примеры.
9. Приведите примеры и сравните частоты колебаний разной формы у одной и той же группы атомов.
10. Какие факторы влияют на частоту и интенсивность полосы поглощения определённой группы атомов?

### Задачи

1. Рассчитать максимальное отклонение атомов от равновесного расстояния в молекуле HBr, находящейся в первом возбуждённом колебательном состоянии. Силовая постоянная – 408 Н/м, r<sub>e</sub> = 1,414 А.  
Ответ: 0,19 А.
2. В спектре поглощения газообразного P<sub>2</sub> имеются полосы 774,8 и 154 см<sup>-1</sup>. Определите частоту колебания гармонического осциллятора P<sub>2</sub>, коэффициент ангармоничности.  
Ответ: 780,4 см<sup>-1</sup>, 3,59·10<sup>-1</sup> см<sup>-1</sup>.
3. Колебательные волновые числа молекул HC1, DC 1, D<sub>2</sub>, HD для основного состояния равны: 2885, 1990, 2990, 3627 см<sup>-1</sup>. Вычислить изменение энергии в кДж/моль в реакции HC1 + D<sub>2</sub> = DC1 + HD. Выделяется или поглощается энергия?  
Ответ: выделяется 1, 54 кДж/моль.
4. Основываясь на правиле отбора, связанном с изменением при колебании дипольного момента молекулы, выясните, будут ли проявляться в ИК-спектре ν<sub>s</sub>, ν<sub>as</sub>, δ - колебания молекул: парадихлорбензола, формальдегида, перекиси водорода, цис- и транс – дихлорэтилена?
5. Пользуясь распределением Больцмана, вычислите отношение заселенностей колебательных уровней с v = 0 и v = 1 для молекул H<sub>2</sub>,  
K<sub>2</sub>, если основные частоты их колебаний равны 4401 см<sup>-1</sup> и 92 см<sup>-1</sup>.  
Температура 298 К.  
Ответ: H<sub>2</sub> – 1,67 10<sup>9</sup>; K<sub>2</sub> – 1,56.

### Колебательно-вращательная спектроскопия

1. Какие из представленных молекул – HC1, H<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>Cl, CCl<sub>4</sub>, CHCl<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl можно исследовать методами вращательной и колебательно-вращательной спектроскопии?

2. Покажите, что симметричного волчка один момент инерции отличается от двух других одинаковых моментов инерции.
3. Имеются ли различия в колебательно-вращательных спектрах молекул  $\text{CO}_2$  и  $\text{HCN}$ ?
4. У молекул  $\text{N}_2\text{O}$  и  $\text{NO}_2$  имеется по 3 основных колебания, некоторые из них видны одновременно в ИК и КР – спектрах. Полосы  $\text{N}_2\text{O}$  имеют простой PR – контур, полосы  $\text{NO}_2$  – сложную вращательную структуру. Каково строение молекул?

### Рефрактометрия

1. Зависимость показателя преломления от длины волны называют:
  - а) рефракцией;
  - б) дисперсией;
  - в) экзальтацией;
  - г) поляризацией;
  - д) аномалией;
  - е) поляризуемостью.
  
2. Каковы причины наличия экзальтации молекулярной рефракции?
  - а) сопряжение связей в молекуле;
  - б) усреднение результатов расчёта по аддитивной схеме;
  - в) ошибка эксперимента;
  - г) наличие нециклической сопряжённой системы у молекулы, конденсированных колец, сопряженных колец.
  
3. В каких случаях зависимость показателя преломления от состава раствора прямолинейна?
  - а) для идеальных растворов, если измерялся  $n_c$  или  $n_F$ ;
  - б) для неокрашенных растворов;
  - в) для идеальных растворов, если состав раствора выражен в объёмных долях или процентах;
  - г) для смесей жидкостей, кипящих при близких температурах.
  
4. Одинаково ли значение молекулярной рефракции одного и того же вещества, вычисленное и по  $n_c$  и по  $n_F$ ?
  - а) одинаково;
  - б)  $R_c$  больше  $R_F$ , т.к.  $F$  – лучи поглощаются веществом;
  - в)  $R_c$  меньше  $R_F$ , т.к. для  $C$ - лучей связевые рефракции меньше;
  - г)  $R_c$  больше  $R_F$ , имеем дело с аномальной дисперсией.
  
5. Что называют молекулярной дисперсией, обладает ли она свойством аддитивности?
  - а) неаддитивное отклонение теоретически вычисленной молекулярной рефракции для  $20^\circ\text{C}$  от экспериментальной;
  - б) разность молекулярных рефракций для двух длин волн; аддитивна, т.к. это разность аддитивных величин;
  - в) произведение удельной дисперсии и молярной массы; аддитивно;
  - г) разность показателей преломления, вычисленная по дисперсионным формулам; аддитивна.
  
6. Каким образом можно получить сведения о молекулярной рефракции твёрдого вещества?
  - а) измерить показатель преломления, вычислить рефракцию;
  - б) для твёрдых веществ показатель преломления практически определить нельзя;
  - в) растворить вещество, измерить  $n_x$  раствора и, используя свойство аддитивности удельной рефракции раствора, зная концентрацию его, вычислить удельную рефракцию раство-

- рѐнного вещества, затем- молекулярную;
- г) по показателю преломления раствора и плотности твѐрдого вещества рассчитываем молекулярную рефракции, из которой вычтем молекулярную рефракцию растворителя.

### Задачи

1. Определите структурную формулу соединений по данным:

	Брутто-формула	t, °C	d, г/см <sup>3</sup>	n <sub>D</sub>
1.	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	20	1,0820	1,3902
2.	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	20	1,0978	1,6105
3.	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	20	0,9010	1,3726
4.	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	20	0,9587	1,3979
5.	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	20	1,0281	1,5340
6.	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	20	1,1989	1,5767
7.	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	20	0,7792	1,4029
8.	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O	17	0,8557	1,4384
9.	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	20	0,6880	1,4010
10.	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O	15	0,8470	1,4212
11.	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O	20	0,9086	n <sub>c</sub> 1,4070
12.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	20	0,7912	n <sub>c</sub> 1,3567
13.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	20	0,8066	n <sub>F</sub> 1,3682

2. Какие инкременты строения (двойные связи, кольца) имеют соединения:

	Брутто-формула	t, °C	d, г/см <sup>3</sup>	n <sub>D</sub>
1.	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	22	0,8081	1,4451
2.	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> Br	20	1,3901	1,5134
3.	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> OBr	16	1,5063	1,5417
4.	C <sub>4</sub> H <sub>16</sub> Cl <sub>2</sub>	20	1,1591	1,4724

### Масс-спектрометрия

1. В чём состоит фокусирующее действие магнитного поля анализатора в масс-спектрометре?
2. Что называется разрешающей силой масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
3. Что называется чувствительностью масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
4. На чём основана идентификация ионов в масс-спектре?
5. Как устанавливается брутто-формула вещества?
6. Приведите примеры закономерностей диссоциативной ионизации органических соединений.
7. Как определяются потенциалы ионизации молекул? Почему при фотоионизации точность определения потенциалов ионизации наивысшая?
8. В чём состоит различие вертикальных и адиабатических потенциалов ионизации?
9. Как определяются энергии разрыва химических связей? Какие данные нужны для их определения?

### 7.3. Шкала академических оценок освоения дисциплины

Виды оценок	Оценки			
Академическая оценка по 4-х балльной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Академическая оценка по 2-балльной шкале (зачет)	Не зачтено		Зачтено	

### 7.4. Система оценки достижений обучающегося по дисциплине

Оценивание аспиранта на промежуточной аттестации в форме зачета

Оценка зачета	Требования к знаниям и критерии выставления оценок
<i>зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует содержание тем учебной дисциплины, владеет основными понятиями, знает теоретические основы физических методов исследования, имеет представление об особенностях физических методов, о специфике применения физических методов для исследования химического состава и структуры химических соединений
<i>не зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует плохое знание значительной части основного материала в области теории физических методов и практических аспектах их применения в исследованиях состава и структуры химических соединений.

## 8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

### 8.1. Основная литература

1. Физические методы исследования их практическое применение в химическом анализе. Учебное пособие / Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. М.: Прометей, 2015. – 196 с.
2. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, 2012. – 683с

### 8.2. Дополнительная литература

1. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий: методы и применение / [Р. Андерхальт, П. Анзалоне, П. Р. Апкарриан и др.] ; под ред. У. Жу, Ж. Л. Уанга ; перевод с англ. С. А. Иванова, К. И. Домкина ; под ред. Т. П. Каминской. - Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 582 с
2. Купцов А. Х. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров / А. Х. Купцов, Г. Н. Жижин. - Москва: Техносфера, 2013. - 695 с.: ил. - (Мир химии). - ISBN 978-5-94836-360-8.

### 8.3. Интернет-ресурсы

1. Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса. [http://www.chem.msu.su/rus/teaching/nifantev/2006\\_NMR.pdf](http://www.chem.msu.su/rus/teaching/nifantev/2006_NMR.pdf).

### 8.4. Методические указания к практическим занятиям

При подготовке к практическому занятию студент должен проработать теоретический материал, относящийся к теме занятия.

Если необходимо решить домашние задачи, заданные на предыдущем занятии необходимо просмотреть записи решений задач, выполненных в аудитории.

Приступая к решению любой задачи, следует выполнять определенные правила:

- Внимательно прочитать условие задачи.
- Решение задач рекомендуется проводить в общем виде. Вычисляются, как правило, только те величины, которые требуются для ответа на вопрос задачи.
- Прежде чем подставлять данные в расчетную формулу необходимо проверить размерность вычисляемой величины. Если размерность вычисляемой величины правильная – можно проводить вычисления, если нет - следует найти ошибки.
- После проведения вычислений необходимо оценить разумность полученного результата.
- Если получен неразумный результат, необходимо проверить правильность вычислений. Если вычисления правильные, следует искать ошибки в решении.
- При записи решения задачи необходимо делать пояснения.
- В конце решения должен быть записан ответ на вопрос задачи.

### **8.5. Методические указания к видам самостоятельной работы**

Самостоятельная работа выполняется во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа предполагает: чтение аспирантами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; подготовку к практическим занятиям; работу с Интернет-источниками; подготовку к сдаче зачёта.

Основными видами самостоятельной работы студентов по данной дисциплине являются предварительная подготовка к практическим занятиям, в том числе и к тем, на которых будет изучаться новый, незнакомый материал. Материал, законспектированный на практических занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины.

По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и, при необходимости, составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса. Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы.