

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



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
учебной дисциплины**

Физико-химические методы анализа

Направление подготовки: 18.06.01 Химические технологии

Направленность: 05.17.07 Химическая технология топлива и
высокоэнергетических веществ

Квалификация выпускника: *Исследователь. Преподаватель исследователь*

Форма обучения: *очная, заочная*

Кемерово, 2015

ЛИСТ
согласования рабочей программы дисциплины (модуля)

Рабочая программа учебной дисциплины *Физико-химические методы анализа* составлена с учетом ФГОС ВО по направлению подготовки 18.06.01 Химические технологии, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30 июля 2014 года № 883, зарегистрировано в Минюсте Российской Федерации 18 августа 2014 года № 33815.

Рабочая программа рекомендована лабораторией катализа в углехимии

Руководитель лаборатории

Исмагилов З.Р., д.х.н., член-корр. РАН

Составитель: Созинов С.А. В.н.с., 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.....	6
4.1.	Содержание разделов учебной дисциплины.....	6
4.2.	Распределение часов по семестрам и видам занятий.....	8
4.3.	Темы, выносимые на лекционные занятия	Ошибка! Закладка не определена.
4.4.	Лабораторные работы	9
4.5.	Практические занятия (семинары).....	9
4.6.	Самостоятельная работа	11
5.	Образовательные технологии.....	Ошибка! Закладка не определена.
6.	Материально-техническое обеспечение дисциплины	Ошибка! Закладка не определена.
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 (Пример).....	16
8.2.	Дополнительная литература (Пример)	17
8.3.	Интернет-ресурсы (Пример).....	17
8.4.	Методические указания к лабораторным занятиям (в свободной форме).....	Ошибка! Закладка не определена.
8.5.	Методические указания к практическим занятиям .	Ошибка! Закладка не определена.
8.6.	Методические указания к видам самостоятельной работы.....	17

1. Цели и задачи освоения учебной дисциплины

Цель дисциплины заключается в освоении аспирантами методологии различных физических методов исследований химических соединений и процессов и овладение практическими навыками использования методов, доступных широкому кругу исследователей, а также знакомство с реже применяющимися, но весьма важными для химии методами получения сведений о строении молекул.

Задачами дисциплины являются:

- изучение теоретических основ физических методов изучения и исследования молекул и химических реакций
- применение освоенных физических методов исследования для определения строения молекул, изучения химических реакций интерпретировать экспериментальные результаты;
- владеть приемами экспериментальной деятельности для определения физико-химических величин и структуры вещества.

2. Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы

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

Для успешного освоения учебной дисциплины необходимо должен знать фундаментальные разделы физики и математики, основы пользования вычислительной техникой, уметь использовать программное обеспечение компьютеров для математических расчетов и обработки экспериментальных данных, знать теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, строение 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>Коды компетенции</i>	<i>Результаты освоения дисциплины ООП Содержание компетенций*</i>	<i>Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине</i>
ОПК-1	способность и готовность к организации и проведению фундаментальных и прикладных научных исследований в области химических технологий	знать: 2. методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современной аппаратуры уметь: 1. ставить задачу и выполнять научные исследования при решении конкретных задач по направлению подготовки с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств
ОПК-2	владение культурой научного исследования в области химических технологий, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий	владеть: 2. приемами экспериментальной деятельности.
ОПК-5	способностью и готовностью к использованию лабораторной и инструментальной базы для получения научных данных	знать: 1. современные методы исследования, возможности

		<p>лабораторной и инструментальной базы</p> <p>уметь:</p> <p>3. использовать техническую документацию при освоении методов лабораторных и инструментальных исследований;</p> <p>1. соблюдать технику безопасности при проведении исследований</p> <p>владеть:</p> <p>1. современными физико-химическими методами анализа для получения научных данных</p>
ПК-1	<p>способность и готовность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, по сформулированной тематике, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок</p>	<p>знать:</p> <p>1. подходы и методы разработок новых материалов и технологий</p> <p>уметь:</p> <p>1. выбирать необходимые методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы, исходя из задач конкретного исследования</p>
ПК-2	<p>способность и готовность использовать основные профессиональные знания о происхождении природных энергоносителей различных видов; методов переработки и возможности получения товарной продукции из различных горючих ископаемых.</p>	<p>владеть:</p> <p>1. навыками применения расчетных методов к исследованию кинетики сложных химических реакций</p> <p>2. навыками физико-химических методов в исследовании топлив</p>
ПК-3	<p>владение теоретическими и практическими навыками оценки технологических параметров качества углей, прогноза возможности их использования в существующих технологиях, определения эффективности получения продуктов из различных углей в разных технологических процессах.</p>	<p>владеть:</p> <p>1. приемами экспериментальной деятельности и способами подачи и защиты полученных результатов.</p>

4. Содержание и структура учебной дисциплины

4.1. Содержание разделов учебной дисциплины

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.

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.

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.

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

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

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

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.

3.4. 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.

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.

4.3. Нежесткий 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.

Рассматриваемые вопросы

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.

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.

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.

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.

7.2. 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.

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.

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.

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.

4.2. Распределение часов по семестрам и видам занятий

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

№ 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.	6	-	2	4	собеседование
2	Электронная спектроскопия сложных молекул.	13	-	6	7	собеседование
3	Колебательная спектроскопия.	12	-	6	6	собеседование
4	Вращательная спектроскопия.	12	-	4	8	собеседование
5	Колебательно-вращательная спектроскопия.	8	-	2	6	собеседование
6	Рефрактометрия.	11	-	4	7	собеседование

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

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.

3.4. 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.

7.3. 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. Доплеровское 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.

Литература:

1.[1]

2. [1], [3].

3. [1], [8].

4. [1], [5].

5. [6]
6. [4]
7. [9]
8. [9]
9. [2], [7].
10. [4]

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	[1-9] (см. п. 8.1), [1-12] (см. п. 8.2), [1-2] (см. п. 8.3),
Итого		63	

5. Образовательные технологии

Для наиболее эффективной реализации компетентностного подхода в рамках учебной дисциплины «Физико-химические методы анализа» предусматривается широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (разбор конкретных ситуаций) 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, помещения для самостоятельной работы. 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.	З 3. ОПК-1; У 1. ОПК-1; В 2. ОПК-2; 3.1.ПК-1; У 1. ПК-1; В.1. ПК-3	собеседование
2.	Электронная спектроскопия сложных молекул.	З 1. ОПК-5; У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
3.	Колебательная спектроскопия.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
4.	Вращательная спектроскопия.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
5.	Колебательно-вращательная спектроскопия.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
6.	Рефрактометрия.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
7.	Спектроскопия в радиочастотной области.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
8.	Метод ядерного гамма-резонанса.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
9.	Масс-спектрометрия.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование
10.	Спектроскопия в области рентгеновского излучения.	У 3. ОПК-5; У.4. ОПК-5; В.1. ОПК-5; В.1. ПК-2; В 2. ПК-2;	собеседование

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

7.2.1. Типовые контрольные задания или иные материалы

а) Типовые задачи и вопросы

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.

- Объясните тот факт, что спектр многоатомной молекулы имеет несколько полос, а не одну.
- 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.

№ рас- твора	1	2	3	4	5	комп. 1	комп. 2
D ³³⁸	0,529	0,575	0,600	0,624	0,665	0,467	0,732
D ³⁶⁸	0,708	0,651	0,606	0,561	0,508	0,804	0,409

Колебательная спектроскопия

- Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции классической механики?
- Какие характеристики двухатомной молекулы влияют на чистоту ее колебания? Напишите уравнение этой зависимости.
- Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
- Каков результат рассмотрения модели ангармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
- Предскажите и сравните ИК-спектры гармонического и ангармонического осцилляторов.
- Справедливо ли утверждение «чем больше частота колебательного перехода, тем больше его интенсивность»?
- Объясните, почему для молекул Br₂, O₂ и других гомоядерных двухатомных молекул не удаётся зарегистрировать ИК- спектр?
- Какие классификации нормальных колебаний Вам известны? Приведите примеры.
- Приведите примеры и сравните частоты колебаний разной формы у одной и той же группы атомов.
- Какие факторы влияют на частоту и интенсивность полосы поглощения определённой группы атомов?

Задачи

- Рассчитать максимальное отклонение атомов от равновесного расстояния в молекуле HBr, находящейся в первом возбуждённом колебательном состоянии. Силовая постоянная – 408 Н/м, $r_e = 1,414 \text{ \AA}$.
Ответ: 0,19 \AA.
- В спектре поглощения газообразного P₂ имеются полосы 774,8 и 154 см⁻¹. Определите частоту колебания гармонического осциллятора P₂, коэффициент ангармоничности.
Ответ: 780,4 см⁻¹, $3,59 \cdot 10^{-1} \text{ см}^{-1}$.
- Колебательные волновые числа молекул HC1, DC 1, D₂, HD для основного состояния равны: 2885, 1990, 2990, 3627 см⁻¹. Вычислить изменение энергии в кДж/моль в реакции HC1 + D₂ = DC1 + HD. Выделяется или поглощается энергия?
Ответ: выделяется 1, 54 кДж/моль.
- Основываясь на правиле отбора, связанном с изменением при колебании дипольного момента молекулы, выясните, будут ли проявляться в ИК-спектре ν_s , ν_{as} , δ - колебания молекул: парадихлорбензола, формальдегида, перекиси водорода, цис- и транс – дихлорэтилена?
- Пользуясь распределением Больцмана, вычислите отношение заселенностей колебательных уровней с $v = 0$ и $v = 1$ для молекул H₂,
K₂, если основные частоты их колебаний равны 4401 см⁻¹ и 92 см⁻¹.
Температура 298 К.

Ответ: $H_2 - 1,67 \cdot 10^9$; $K_2 - 1,56$.

Колебательно-вращательная спектроскопия

1. Какие из представленных молекул – $HC1$, H_2 , $C1_2$, C_2H_4 , CH_3C1 , $CC1_4$, $CHC1_3$, C_6H_6 , C_6H_5C1 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 CO_2 и HCN ?
4. У молекул N_2O и NO_2 имеется по 3 основных колебания, некоторые из них видны одновременно в ИК и КР – спектрах. Полосы N_2O имеют простой PR – контур, полосы 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 $20^\circ C$ 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.

- б. Каким образом можно получить сведения о молекулярной рефракции твёрдого вещества?
- измерить показатель преломления, вычислить рефракцию;
 - для твёрдых веществ показатель преломления практически определить нельзя;
 - растворить вещество, измерить n_x раствора и, используя свойство аддитивности удельной рефракции раствора, зная концентрацию его, вычислить удельную рефракцию растворённого вещества, затем- молекулярную;
 - по показателю преломления раствора и плотности твёрдого 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 ³	n _D
1.	C ₄ H ₆ O ₃	20	1,0820	1,3902
2.	C ₆ H ₈ N ₂	20	1,0978	1,6105
3.	C ₄ H ₈ O ₂	20	0,9010	1,3726
4.	C ₄ H ₈ O ₂	20	0,9587	1,3979
5.	C ₈ H ₈ O	20	1,0281	1,5340
6.	C ₁₄ H ₁₀ O ₃	20	1,1989	1,5767
7.	C ₆ H ₁₂ O	20	0,7792	1,4029
8.	C ₄ H ₆ O	17	0,8557	1,4384
9.	C ₆ H ₁₀	20	0,6880	1,4010
10.	C ₆ H ₁₀ O	15	0,8470	1,4212
11.	C ₄ H ₄ O	20	0,9086	n _c 1,4070
12.	C ₃ H ₆ O	20	0,7912	n _c 1,3567
13.	C ₃ H ₆ O	20	0,8066	n _F 1,3682

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

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

Масс-спектрометрия

- В чём состоит фокусирующее действие магнитного поля анализатора в масс-спектрометре?
- Что называется разрешающей силой масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
- Что называется чувствительностью масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
- На чём основана идентификация ионов в масс-спектре?
- Как устанавливается брутто-формула вещества?
- Приведите примеры закономерностей диссоциативной ионизации органических соединений.
- Как определяются потенциалы ионизации молекул? Почему при фотоионизации точность определения потенциалов ионизации наивысшая?
- В чём состоит различие вертикальных и адиабатических потенциалов ионизации?
- 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 (нормативная)	Требования к знаниям и критерии выставления оценок
<i>Зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует содержание тем учебной дисциплины, владеет основными понятиями, знает особенности развития и классификации физических методов исследований, имеет представление об особенностях работы на современном оборудовании, о специфике исследований различных веществ современными методами
<i>не зачтено</i>	Аспирант при ответе демонстрирует плохое знание значительной части основного материала в области физико-химических методов анализа. Не информирован или слабо разбирается в проблемах, и или не в состоянии наметить пути их решения.

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Основная литература

1. Аналитическая химия. Хроматографические методы анализа : [учебное пособие по специальности "Фармация" и химическим специальностям] / А. И. Жебентяев. - Москва : ИНФРА-М ; Минск : Новое знание, 2013. - 205 с. : ил. ; 22 см. - (Высшее образование). - Библиогр.: с. 204-205. - 1000 экз. - ISBN 978-5-16-006615-8. - ISBN 978-985-475-553-3
2. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий : методы и применение / [Р. Андерхальт, П. Анзалоне, П. Р. Апкариан и др.] ; под ред. У. Жу, Ж. Л. Ванга ; перевод с англ. С. А. Иванова, К. И. Домкина ; под ред. Т. П. Каминской. - Москва : Бинном. Лаборатория знаний, 2012. - 582 с
3. Введение в рентгенографию катализаторов / Л. М. Плясова ; Рос. акад. наук, Ин-т катализа им. Г. К. Борескова Сиб. отд-ния РАН. - Новосибирск : Институт катализа, 2010. - 58 с
4. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе : [пособие] / под ред. Е. А. Паукштиса ; Ин-т катализа им. Г. К. Борескова Сиб. отд-ния Рос. акад. наук. - Новосибирск : Институт катализа.
5. Ч. 2 : Спектроскопия в УФ и Видимом диапазонах. Новые методики колебательной спектроскопии для изучения поверхности / [Паукштис Е. А. и др.]. - 2012. - 99 с.
6. Высокоэффективная жидкостная хроматография : аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем : учебное пособие / С. Н. Сычев, В. А. Гаври-

лина. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2013. - 255 с. : ил. ; 21 см. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 978-5-8114-1377-5 (в пер.)

7. 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 (в пер.)
8. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков : [учебник для вузов] / Воловенко Ю. М., Карцев В. Г., Комаров И. В. [и др.]. - Москва : Международный благотворительный фонд "Научное партнерство", 2011. - 694 с. : ил. ; 25 см. - Предм. указ.: с. 681-694. - Библиогр.: с. 680.

8.2. Дополнительная литература

1. Аналитическая химия. В 3 т. Т. 1. Методы идентификации и определения веществ: учеб. для студ. высш. учеб. заведений / [А. А. Белюстин и др.]; под. ред. Л.Н. Москвина. – М.: Издательский центр «Академия», 2008. – 576 с.
2. Васильев, В. П. Аналитическая химия. В 2 кн. Кн. 2: Физико-химические методы анализа: учеб. для студ. вузов, обучающихся по химико-технол. спец. /В. П. Васильев. – 2-е изд. – М.: Дрофа, 2002. – 383 с
3. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, 2006.
4. Физические методы исследования неорганических веществ. Под ред. Никольского А. Б. – М.: Академия, 2006.
5. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. – М.: Высш. шк., 1987.
6. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. – М.: Высш. шк., 1989.
7. Казицына Л. А., Куплетская Н. Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- спектроскопии в органической химии. – М.: Высш. шк., 1971.
8. Бенуэл К. основы молекулярной спектроскопии. – М.: 1985.
9. Каррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. – М.: Мир, 1970.
10. Ионин Б.И., Ершов Б.А. ЯМР-спектроскопия в органической химии. – Л.: Химия, 1967.
11. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
12. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. – Л.: Химия, 1974.
13. Блюмих Б. Основы ЯМР. – М.: Техносфера, 2007.

8.3. Интернет-ресурсы

1. Научная Электронная Библиотека eLibrary – библиотека электронной периодики, режим доступа: <http://elibrary.ru/>, по паролю. – Загл. с экрана,
2. НЭБ КиберЛенинка научная электронная библиотека открытого доступа, режим доступа <http://cyberleninka.ru/>, свободный. – Загл. с экрана,

8.4. Методические указания к видам самостоятельной работы

Самостоятельная работа выполняется во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Основными видами самостоятельной работы студентов по данной дисциплине являются:

предварительная подготовка к лекционным занятиям, в том числе и к тем, на которых будет изучаться новый, незнакомый материал. Такая подготовка предполагает изучение учебной программы, установление связи с ранее полученными знаниями, выделение наиболее значимых и актуальных проблем, на изучении которых следует обратить особое внимание, самостоятельная работа при прослушивании лекций, осмысление учебной информации, сообщаемой преподавателем, ее обобщение и краткая запись, а также своевременная доработка конспектов лекций, выяснение наиболее сложных, непонятных вопросов и их уточнение во время консультаций, подготовка к контрольным занятиям, экзамену. Источниками для самостоятельного изучения теоретического курса выступают:- учебные пособия по предмету;- курсы лекций по предмету;- научные статьи в периодической печати;- научные монографии.