

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

04.03.01 «Химия»

5 семестр

#### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целями освоения дисциплины являются:** ознакомление студентов с принципиальными основами и практическими возможностями методов молекулярной спектроскопии, с их аппаратурным оснащением и условиями проведения эксперимента; формирование навыков сравнительной оценки возможностей разных методов анализа, их достоинств и недостатков для обоснованного выбора оптимального метода исследования того или иного объекта.

#### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» относится к вариативной части ОПОП.

Данный курс опирается на знания по физике, математике (природа электромагнитного излучения, типы взаимодействия его с матрицей, техника спектрального эксперимента, приемы математического анализа). Для успешного применения ряда физических методов необходимо знание основ квантовой механики (основные определения и фундаментальные понятия, квантово-механическая теория строения молекул). Изложение материала о строении молекул предполагает наличие базовых знаний о современных вычислительных возможностях квантовой химии. Интенсивное внедрение в эксперимент вычислительной техники требует наличия у студентов навыков работы как со стандартными программными системами, широко используемыми в настоящее время для обработки экспериментальных данных, так и владения современным языком математической формализации тех физических задач, которые возникают при анализе спектральных данных.

Полученные студентами знания необходимы при изучении таких дисциплин, как «Методы анализа объектов окружающей среды», «Нефтехимия», «Химическая экспертиза».

#### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕ- ЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины студент должен демонстрировать следующие результаты обучения:

**Знать:** знать физическую теорию современных методов исследования, технику и методики проведения экспериментов (ПК-3 способен использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности).

**Владеть:** методологией проведения экспертных исследований (ПК-2 владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований).

**Уметь:** анализировать возможности методов молекулярной спектроскопии, исходя из специфики поставленной исследовательской или экспертной задачи (ПК-4 способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов).

#### 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основные разделы:

ВВЕДЕНИЕ: Общая характеристика и классификация физических методов исследования, Спектроскопические, дифракционные и оптические методы, Фурье-спектроскопия, Вынужденное излучение, Лазеры.

МИКРОВОЛНОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: Вращательные спектры молекул, Квантовомеханический подход к описанию спектров, Интенсивность полос вращательных спектров, Применение вращательной спектроскопии для определения геометрического строения молекул, Определение дипольных моментов, Эффект Штарка.

ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: Колебательные и колебательно-вращательные спектры молекул, Квантовомеханический подход к описанию спектров, Интенсивность полос в спектрах, Симметрия молекул, Основные элементы симметрии, Точечные группы симметрии, Симметрия колебаний, Активность колебаний в ИК-спектрах, Валентные и деформационные колебания, Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты, Групповые частоты: их использование и ограничения, Факторы, влияющие на групповые частоты, Интерпретация спектров.

СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ: КР-спектры, Активность колебаний в КР-спектрах, Поляризация линий КР, Резонансная КР-спектроскопия, Применение КР-спектроскопии для определения структуры молекул и идентификации соединений, Техника и методики КР-спектроскопии.

СПЕКТРОСКОПИЯ В ВИДИМОЙ И УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ОБЛАСТЯХ: Электронные состояния молекул, Электронные переходы: классическое и квантовомеханическое представление, Вероятность и правила отбора переходов, Возбужденные состояния и спектры люминесценции, Применение методов электронной спектроскопии.

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: Физическая модель эмиссии электронов при возбуждении ионизирующим излучением, Параметры и структура фотоэлектронных спектров, Применение методов фотоэлектронной спектроскопии.

## 5. ВИД АТТЕСТАЦИИ – экзамен.

## 6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ – 7.

Составитель: доцент кафедры химии, д.х.н. Смирнова Н.Н.

Заведующий кафедрой химии

Председатель

Учебно-методической комиссии направления 04.03.01

Директор Института биологии и экологии

М.П.



 Б.А. Кухтин

 Б.А. Кухтин

 М.Е. Ильина



16.09.15