

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Владимирский государственный университет  
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УМР

А.А.Панфилов

« 16 » 04 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

ение подготовки 04.03.01 Химия  
высшего образования бакалавриат  
бучения очная

Трудоемкость зач. ед./час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежу- точного контроля (экз./зачет. час.)
7/252	54	18	18	126	Экзамен, 36
7/252	54	18	18	126	Экзамен, 36

Владимир 2015

*Handwritten signature*

## ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целью освоения дисциплины является:** 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.

### 1. 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 методов молекулярной спектроскопии 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 РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины студент должен демонстрировать следующие результаты обучения:

**Знать:** знать физическую теорию современных методов исследования, технику и методики проведения экспериментов (ОПК-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. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц, 252 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Вид учебной работы, включая СРС и трудоемкость, час.								Объем уч.раб. с примен. интеракт методов (час.)	Формы контр. успеваемости	
				Лекции	Консульт.	Семинары	Практ.зан.	Лаб.работ.	Контр.раб	СРС	КП/КР			
1.	Общая характеристика физических методов исследования. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Фурье-спектроскопия. Вынужденное излучение. Лазеры.	5	1	2							10		2 (100)	
2.	Микроволновая спектроскопия. Вращательный спектр молекул. Определение дипольных моментов молекул. Эффект Штарка.	5	2	4							16		4 (100)	
3.	Инфракрасная спектроскопия. Колебательный и колебательно-вращательный спектр молекул. Симметрия молекул. Элементы и точеч-	5	3-10	24			10	10			46		34 (77)	Рейтинг-контроль №1

	ные группы симметрии. Активность колебаний в ИК-спектрах. Групповые частоты: их использование и ограничения. Техника эксперимента.											
4.	Спектроскопия комбинационного рассеяния. Поляризация в спектрах КР. Резонансная КР-спектроскопия.	5	11-12	6					12		6 (100)	Рейтинг-контроль № 2
5.	Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях. Электронные переходы и электронные спектры молекул.	5	13-17	14			8	8		26	22 (73)	
6.	Фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС, РЭС, ОЭС). Физическая модель эмиссии электронов. Параметры фотоэлектронных спектров.	5	18	4						16	6 (100)	Рейтинг-контроль № 3
	Всего, час.			54			18	18		126	90 (80)	Экзамен, 36

## 5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Преподнесение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения при непосредственном прочтении данного материала лектором.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные и устные контрольные работы.

## **6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ**

### **Контрольные вопросы и задания для проведения контроля самостоятельной работы:**

1. Классификация физических методов исследования. Дифракционные методы.
2. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. Принципиальная схема и классификация спектральных приборов. Фурье – спектроскопия. Характеристика источников излучения. Лазеры. Характеристическое время метода
3. Спектроскопические методы. Классический и квантово-механический подходы к объяснению спектров. Классификация спектров в зависимости от условий получения, природы объекта, типа его энергетических переходов и разрешающей способности спектрального прибора.
4. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Классическая модель «жесткого ротатора». Вращательная энергия, угловая скорость вращения, частота вращения, момент инерции.
5. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантово-механическая модель «жесткого ротатора». Вращательный терм, вращательная постоянная. Правило отбора квантовых чисел, разрешенные переходы в спектрах поглощения.
6. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантово-механическая модель «жесткого ротатора». Интенсивность линий вращательного спектра.
7. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантово-механическая модель «жесткого ротатора». Изотопозамещение. Почему для определения геометрических параметров молекул (кроме двухатомных) по вращательным спектрам необходимо исследовать ее изотопомеры? Какую дополнительную информацию может дать исследование вращательных спектров изотопозамещенных двухатомных молекул?
8. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия многоатомных молекул. Линейные молекулы, сферический волчок, симметричный волчок, асимметричный волчок. Правила отбора, волновые числа, разрешенные переходы.
9. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Определение дипольных моментов молекулы по МВ-спектрам.
10. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул.
11. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательно-вращательный ИК-спектр двухатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.
12. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Фундаментальные, обертоновые, составные или комбинированные частоты и «горячие» полосы.

13. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Нормальные и вырожденные колебания. Активность колебаний в ИК-спектрах. Элементы симметрии молекул.
14. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. Линейные молекулы и симметричные волчки: параллельный и перпендикулярный колебательные переходы. Контуры вращательной структуры колебательно-вращательных полос в ИК-спектрах линейных молекул.
15. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Техника эксперимента. Подготовка образцов. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов. Преимущества и недостатки различных способов пробоподготовки.
16. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектров для идентификации соединений. Групповые частоты. Внутренние и внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты.
17. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Классическая модель комбинационного рассеяния.
18. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Квантово-механическая модель комбинационного рассеяния. Возможность определения симметрии молекулы на основе данных ИК- и КР- спектроскопии.
19. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Поляризация в спектрах КР. Поляризованные линии в спектре поглощения. Степень деполяризации, ее взаимосвязь с симметрией молекулы.
20. Спектроскопические методы. Возможность проведения структурного анализа на основе данных ИК- спектроскопии и спектроскопии КР.
21. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Энергия молекулы в заданном электронном состоянии. Волновая функция. Степень вырождения состояния. Мультиплетность состояния. Среднее время жизни электронного состояния.
22. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Орбитальный и спиновый момент количества движения электронов.
23. Использование спектроскопических методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.
24. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Волновая функция. Молекулярные и атомные орбитали. Волновая функция и операции симметрии.
25. Электронные переходы. Классическое представление. Хромофоры и ауксохромы. Квантово-механическое представление.  $\sigma \rightarrow \sigma^*$ ,  $n \rightarrow \sigma^*$ ,  $n \rightarrow \pi^*$  электронные переходы. Смещение полос поглощения в спектрах: батахромный и гипсохромный сдвиг, гипохромный и гиперхромный эффекты.
26. Электронные спектры молекул. Колебательная структура электронных спектров. Электронные переходы. Вибронные переходы. Переходы с переносом заряда.
27. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Вероятность переходов. Коэффициент Эйнштейна для самопроизвольного и вынужденного испускания и поглощения. Коэффициент экстинкции.
28. Электронные спектры молекул. Спектры флуоресценции и фосфоресценции. Выход люминесценции.
29. Фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС, РЭС, ОЭС). Физическая модель эмиссии фотоэлектронов. Параметры фотоэлектронных спектров.
30. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. ЭПР.

### **Контрольные вопросы и задания для проведения рейтинг-контроля №1:**

1. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. Классический и квантовомеханический подходы к объяснению спектров. Классификация

спектров в зависимости от условий получения, природы объекта, типа его энергетических переходов и разрешающей способности спектрального прибора.

2. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. Принципиальная схема и классификация спектральных приборов. Фурье – спектроскопия.

3. Классификация физических методов исследования. Дифракционные методы.

4. Классификация физических методов исследования. Характеристика источников излучения. Лазеры. Характеристическое время метода

5. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Классическая модель «жесткого ротатора». Вращательная энергия, угловая скорость вращения, частота вращения, момент инерции.

6. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантовомеханическая модель «жесткого ротатора». Вращательный терм, вращательная постоянная. Правило отбора квантовых чисел, разрешенные переходы в спектрах поглощения.

7. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантовомеханическая модель «жесткого ротатора». Интенсивность линий вращательного спектра.

8. Оцените межатомное расстояние в молекуле  $\text{HCl}$ , если экспериментально найденное расстояние между двумя линиями вращательного спектра поглощения составляет  $\approx 20,8 \text{ см}^{-1}$ .

9. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Квантовомеханическая модель «жесткого ротатора». Изотопозамещение.

Почему для определения геометрических параметров молекул (кроме двухатомных) по вращательным спектрам необходимо исследовать ее изотопомеры? Какую дополнительную информацию может дать исследование вращательных спектров изотопозамещенных двухатомных молекул?

10. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Вращение и вращательная энергия многоатомных молекул. Линейные молекулы, сферический волчок, симметричный волчок, асимметричный волчок. Правила отбора, волновые числа, разрешенные переходы.

11. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Определение дипольных моментов молекулы по МВ-спектрам.

12. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул.

13. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательно-вращательный ИК-спектр двухатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.

14. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Фундаментальные, обертоновые, составные или комбинированные частоты и «горячие» полосы.

15. Использование спектроскопических методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.

**Контрольные вопросы и задания для проведения рейтинг-контроля №2:**

1. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Нормальные и вырожденные колебания. Активность колебаний в ИК-спектрах. Элементы симметрии молекул.

2. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний.

3. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. Линейные молекулы и симметричные волчки: параллельный и перпендикулярный колебательные переходы. Контуры вращательной структуры колебательно-вращательных полос в ИК-спектрах линейных молекул.

4. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр двухатомных и многоатомных молекул. Фундаментальные, обертоновые, составные частоты и «горячие» полосы.

5. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Вращательная структура ИК-спектров двухатомных и многоатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.

6. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Элементы симметрии молекул. Активность колебаний в ИК-спектрах.

7. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний. Точечные группы. Их классификация.

8. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Ближняя, средняя и дальняя ИК-область. Техника эксперимента. Классификация спектрометров. Основные преимущества интерференционных Фурье-спектрометров.

9. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Техника эксперимента. Подготовка образцов. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов. Преимущества и недостатки различных способов пробоподготовки.

10. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектров для идентификации соединений. Групповые частоты.

11. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: изменения масс, геометрия, колебательное взаимодействие.

12. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: порядок связи, электронные эффекты, ассоциация.

13. Использование спектроскопических методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.

14. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: агрегатное состояние, растворитель, концентрация, температура.

15. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ.

16. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ и структурного анализа. Особенности использования корреляционных таблиц.

17. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Специальные задачи и методы количественного анализа.

18. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Классическая модель комбинационного рассеяния.



19. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Квантовомеханическая модель комбинационного рассеяния. Возможность определения симметрии молекулы на основе данных ИК- и КР- спектроскопии.

20. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Поляризация в спектрах КР. Поляризованные линии в спектре поглощения. Степень деполяризации, ее взаимосвязь с симметрией молекулы.

21. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Резонансное комбинационное рассеяние.

22. Спектроскопические методы. Возможность проведения структурного анализа на основе данных ИК- спектроскопии и спектроскопии КР.

23. Спектроскопические методы. Идентификация соединений на основе данных ИК- спектроскопии и спектроскопии КР.

24. Спектроскопические методы. Спектроскопия КР и ИК-спектроскопия. Общее и различия.

25. Спектроскопические методы. Возможность их применения при решении задач структурного анализа и идентификационных исследованиях.

### **Контрольные вопросы и задания для проведения рейтинг-контроля №3:**

1. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Энергия молекулы в заданном электронном состоянии. Волновая функция. Степень вырождения состояния. Мультиплетность состояния. Среднее время жизни электронного состояния.

2. Использование спектроскопических и резонансных методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.

3. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Орбитальный и спиновый момент количества движения электронов.

4. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Волновая функция. Молекулярные и атомные орбитали. Волновая функция и операции симметрии.

5. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Классическое представление. Хромофоры и ауксохромы.

6. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Квантовомеханическое представление.  $\sigma \rightarrow \sigma^*$ ,  $n \rightarrow \sigma^*$ ,  $n \rightarrow \pi^*$  электронные переходы. Смещение полос поглощения в спектрах: батахромный и гипсохромный сдвиг, гипохромный и гиперхромный эффекты.

7. Электронные спектры молекул. Колебательная структура электронных спектров. Электронные переходы. Вибронные переходы. Переходы с переносом заряда.

8. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Вероятность переходов. Коэффициент Эйнштейна для самопроизвольного и вынужденного испускания и поглощения. Коэффициент экстинкции.

9. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Правила отбора.

10. Электронные спектры молекул. Спектры флуоресценции и фосфоресценции. Выход люминесценции.

11. Использование спектроскопических и резонансных методов при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.

12. Электронные спектры молекул. Возможности использования методов электронной спектроскопии для идентификации соединений и определения их структуры. Количественный анализ в УФ-спектроскопии.

13. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин ядра. Магнитный момент ядра. Ядерный магнетон. Гиромагнитное отношение и ядерный фактор. Условие ЯМР для двухуровневой системы.

14. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР.

15. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие. Гомоядерные и гетероядерные спиновые системы. Химически эквивалентные и неэквивалентные ядра. Мультиплетность сигналов ЯМР.
16. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие. Константа спин-спинового взаимодействия.
17. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Возможности использования ЯМР в структурных исследованиях.
18. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Множественный магнитный резонанс.
19. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Техника эксперимента и методики работы с образцами.
20. Радиоспектроскопические методы. ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Фактор Ланде. Константа СТВ.

### **Контрольные вопросы и задания для проведения промежуточной аттестации:**

1. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Теоретические основы метода. Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул. Классическая модель «Жесткого ротатора».
2. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Теоретические основы метода. Квантовомеханическая модель. Вращательный терм, вращательная постоянная, правила отбора квантовых чисел, разрешенные переходы в спектрах поглощения. Интенсивность линий вращательного спектра.
3. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Теоретические основы метода. Изотопозамещение.
4. Спектроскопические методы. МВ-спектроскопия. Теоретические основы метода. Вращательная энергия многоатомных молекул. Линейные молекулы, сферический волчок, симметричный волчок, асимметричный волчок.
5. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул. Колебательный ИК- спектр. Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул.
6. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. P-, R-, Q- ветви. Контуры вращательной структуры колебательно-вращательных полос.
7. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. Многоатомные молекулы. Нормальные и вырожденные колебания. Активность колебаний в ИК-спектрах.
8. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. Фундаментальные частоты, обертоны, «горячие полосы». Взаимосвязь колебательно-вращательной структуры ИК-спектров и симметрии многоатомных молекул.
9. Использование МВ-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач. Определение геометрического строения молекул.
10. Использование МВ-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач. Определение дипольных моментов молекул.
11. Использование ИК-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ и структурного анализа.
12. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Групповые частоты. Внутренние факторы, оказывающие на них влияние.
13. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Групповые частоты. Внешние факторы, оказывающие на них влияние.

14. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Теоретические основы метода. Классическая модель комбинационного рассеяния. Взаимосвязь индуцированного дипольного момента и поляризуемости молекулы. Рылеевское рассеяние.
15. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Теоретические основы метода. Квантовомеханическая модель КР. Активность колебаний в КР-спектре. Колебательная и колебательно-вращательная структура КР-спектров. S-, Q-, O- ветви.
16. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Теоретические основы метода. Поляризация в спектрах КР. Степень деполяризации и ее взаимосвязь с симметрией молекулы.
17. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Теоретические основы метода. РКР.
18. Возможности использования методов КР- спектроскопии для идентификации соединений и определения их структуры.
19. Использование КР-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач. Возможности использования КР- и ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ и структурного анализа.
20. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Электронное состояние молекул. Энергия молекулы. Волновая функция. Степень вырождения состояния и его мультиплетность. Среднее время жизни электронного состояния. Орбитальный и спиновый момент количества движения электронов. Молекулярные и атомные орбитали.
21. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Возбужденные состояния и спектры люминесценции. Фотолюминесценция и фосфоресценция. Выход люминесценции.
22. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Электронные переходы. Классическое представление. Хромофоры и аукохромы.
23. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Квантовомеханическое представление. N-V, N-Q, N-R переходы. Смещение полос в спектрах.
24. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Квантовомеханическое представление. Вибронные переходы. Переходы с переносом заряда. Вероятность перехода.
25. Спектроскопические методы. Спектроскопия в видимой и УФ-областях. Теоретические основы метода. Коэффициент Эйнштейна для самопроизвольного и вынужденного испускания и поглощения. Коэффициент экстинкции. Правила отбора переходов.
26. Использование спектроскопии в видимой и УФ- области при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.
27. Фотоэлектронная спектроскопия. Физическая модель эмиссии фотоэлектронов. Параметры фотоэлектронных спектров.
28. Структура фотоэлектронных спектров. Применение методов ФЭС.
29. Охарактеризуйте возможности использования методов молекулярной спектроскопии при проведении фундаментальных исследований.
30. Охарактеризуйте возможности использования методов ФЭС при проведении фундаментальных и прикладных исследований.
31. Охарактеризуйте возможности использования методов молекулярной спектроскопии при проведении фундаментальных исследований.
32. Дайте сравнительную оценку и охарактеризуйте возможности использования рассмотренных методов молекулярной спектроскопии при проведении прикладных идентификационных исследований.

33. Дайте сравнительную оценку и охарактеризуйте возможности использования рассмотренных методов молекулярной спектроскопии при проведении прикладных структурных исследований.

#### **Тематика практических занятий по курсу**

1. Идентификация органических соединений. ИК-спектры основных классов органических соединений (10 ч).
2. Идентификация органических соединений. Электронные спектры основных классов органических соединений (8 ч).

#### **Тематика лабораторных работ по курсу**

1. Идентификация органических соединений с использованием методов молекулярной спектроскопии (4 ч).
2. Структурные исследования с применением методов молекулярной спектроскопии (6 ч).
3. Количественный анализ с использованием спектроскопии в УФ- и видимой области (4 ч).
4. Идентификация неорганических соединений методом ААС (4 ч).

## **7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

#### **Основная литература:**

1. Капустин В.И., Коржавый А.П. Поверхностно-ионизационная дрейф-спектрометрия. М.: ИНФРА-М, 2015, 286 с. (доступ через библиотеку ВлГУ)
2. Криштафович В.И., Криштафович Д.В. Физико-химические методы исследования. М.: ДАШКОВ и К, 2015, 390 с. (доступ через библиотеку ВлГУ)
3. Волкова В.Д., Абесадзе Л.Т. Физико-химические методы анализа: практикум. М.: ДАШКОВ и К, 2012, 224 с. (доступ через библиотеку ВлГУ)

#### **Дополнительная литература:**

1. Другов Ю.С., Родин А.А. Анализ загрязненной почвы и опасных отходов. - М: БИНОМ, 2015, 452 с. (библиотека ВлГУ)
2. Другов Ю.С., Родин А.А. Анализ загрязненной воды: Практическое руководство. - М: БИНОМ, 2015, 678 с. (доступ через библиотеку ВлГУ)
3. Другов Ю.С., Родин А.А. Экологический анализ при разливах нефти и нефтепродуктов - М: БИНОМ, 2015. (доступ через библиотеку ВлГУ)
4. Зайцев Б.Е., Ковальчукова О.В., Страшнова С.Б. Применение ИК-спектроскопии в химии. М.: РУДН, 2008, 280 с. (доступ через библиотеку ВлГУ)
5. Амелин В.Г. Спектроскопические методы анализа: практикум. - Владимир: ВлГУ, 2008, 48 с. (библиотека ВлГУ)

## **Программное обеспечение и интернет-ресурсы.**

1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.ihik.lib.ru/>
3. <http://www.y10k.ru/books/>
4. <http://www.iupac.org/>
5. <http://194.67.119.21:89/GetContentForm.asp>
6. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
7. <http://www.anchem.ru/literature/>
8. <http://www.sciencedirect.com>
9. <http://chemteq.ru/lib/book>
10. <http://www.chem.msu.su/rus>
11. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
12. <http://www.elsevier.com/>
13. <http://www.uspkhim.ru/>
14. <http://www.strf.ru/database.aspx>

## **8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

При чтении лекционного курса и проведении практических занятий используется информация, представленная на слайдах.

При изучении техники ИК- спектроскопии, спектроскопии в видимой и УФ-областях демонстрируются приборы, установленные в лаборатории «Физико-химические методы анализа» ВлГУ.

Лабораторные работы выполняются на оборудовании лаборатории «Физико-химические методы анализа» ВлГУ.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 04.03.01 Химия

Рабочую программу составил  к.х.н. доцент Смирнова Н.Н.

Рецензент  к.х.н. ст.н.с. лаборатории химического анализа ФГБУ «Федеральный центр охраны здоровья животных» Большаков Д.С.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 7/1 от 14.04 2015 года

Заведующий кафедрой  /Кухтин Б.А./

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.03.01 Химия

Протокол № 7/1 от 16.04 2015 года

Председатель комиссии  /Кухтин Б.А./

(ФИО, подпись)

**Лист переутверждения  
рабочей программы дисциплины**

Рабочая программа одобрена на 2015/2016 учебный год  
Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года.  
Заведующий кафедрой Куртеев

Рабочая программа одобрена на 2016/2017 учебный год  
Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года.  
Заведующий кафедрой Куртеев

Рабочая программа одобрена на 2017/2018 учебный год  
Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.2017 года.  
Заведующий кафедрой Куртеев