

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

Институт биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ

Директор института

Н.Н. Смирнова

« 24

2022 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

направленность (профиль) подготовки

химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов окружающей среды

г. Владимир
2022 год

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины: Изучение теоретических основ методов молекулярной спектроскопии.

Задачи: ознакомление студентов с принципиальными основами и практическими возможностями методов молекулярной спектроскопии, с их аппаратным 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 части ОПОП, формируемой участниками образовательных отношений.

Пререквизиты дисциплины: физика, математика (природа электромагнитного излучения, типы взаимодействия его с матрицей, техника спектрального эксперимента, приемы математического анализа), квантовая механика (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.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине «Молекулярная спектроскопия», соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	
ПК-4 способен проводить химический анализ растворов, материалов и образцов изделий в соответствии с требованиями технологической документации	ПК-4.1 Знает стандарты, методики и инструкции, определяющие порядок разработки и оформления отчетной документации по результатам исследований и разработок; ПК-4.2. Умеет выбирать методы, инструменты и оборудование для проведения химического анализа; ПК-4.3. Владеет современными методами проведения экспериментов и наблюдений в области	Знает: теоретические основы физических методов исследования; Владеет: методологией проведения экспертных исследований; Умеет: анализировать возможности различных методов, исходя из спецификации поставленной исследовательской задачи	КР Вопросы, тестовые вопросы

	профессиональной деятельности		
ПК-6 способен производить лабораторные исследования, анализы отобранных проб и образцов для оценки экологического состояния объектов	ПК-6.1 Знает основы физико-химических методов исследования объектов окружающей среды; ПК-6.2. Умеет производить лабораторные исследования, замеры, анализы отобранных природных образцов; рассчитывать предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ техногенного характера; работать на аналитическом лабораторном оборудовании; ПК-6.3 Владеет методами проведения экологического мониторинга	Знает: возможности физических методов исследования при решении различных прикладных задач; Владеет: навыками получения необходимых данных в рамках мониторинговых исследований; Умеет: применять результаты мониторинговых исследований для оценки экологического состояния объектов	КР Вопросы, тестовые вопросы

4. ОБЪЁМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц, 252 часа.

Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником (в часах)				СРС	Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	В форме практической подготовки		
1.	Введение.	5	1	4				6	
2.	Микроволновая спектроскопия.	5	2-3	4			2	6	
3.	Инфракрасная спектроскопия.	5	3-5	8	20	8	8	20	Рейтинг-контроль № 1
4.	Спектроскопия комбинационного рассеяния.	5	6-7	4				6	
5.	Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.	5	7-12	16	8	28	28	26	Рейтинг-контроль № 2

	Фотоэлектронная спектроскопия.								
6.	Методы радиоспектроскопии магнитного резонанса.	5	13-17	14	8		4	20	
7.	Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса.	5	17-18	4			2	6	Рейтинг-контроль № 3
	Наличие в дисциплине КП/КР				+				
Итого по дисциплине, час.		252		54	36	36		90	Экзамен, 36

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел 1. Введение.

Тема 1: Общая характеристика физических методов исследования.

Содержание темы:

Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Излучение и происхождение спектров. Фурье-спектроскопия. Вынужденное излучение. Лазеры.

Тема 2: Симметрия молекул и основы теории групп.

Содержание темы:

Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Общие положения теории групп.

Раздел 2. Микроволновая спектроскопия.

Тема 1: Вращение и вращательная энергия двухатомных молекул.

Содержание темы:

Классическая модель. Квантово-механическая модель жёсткого ротатора. МВ-спектр жёсткого ротатора. Заселённость уровней и интенсивность линий. Определение межъядерного расстояния. Изотопический эффект.

Тема 2: Вращение многоатомных молекул.

Содержание темы:

Общее выражение вращательной энергии. Энергетические термы и спектры волчков разного типа.

Тема 3: Применение вращательной спектроскопии.

Содержание темы:

Определение геометрического строения молекул. Эффект Штарка и его применение для определения дипольных молекул. Техника и методики эксперимента.

Раздел 3. Инфракрасная спектроскопия.

Тема 1: Теоретические основы метода. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул.

Содержание темы:

Правила отбора. Колебательные переходы для гармонического осциллятора и реальных молекул. Колебательно-вращательный ИК-спектр двухатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.

Тема 2: Колебания многоатомных молекул.

Содержание темы:

Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Колебательно-вращательная структура ИК-спектров. Линейные молекулы и симметричные волчки: параллельный и перпендикулярный колебательные переходы. Контуры вращательной структуры колебательно-вращательных полос в ИК-спектрах. Фундаментальные, обертоновые, составные частоты и «горячие» полосы.

Тема 3: Техника эксперимента. Применения метода.

Содержание темы:

Подготовка образцов. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов. Преимущества и недостатки различных способов пробоподготовки. Возможности использования ИК-спектров для идентификации соединений. Групповые частоты. Внутренние факторы и внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты. Особенности использования корреляционных таблиц.

Раздел 4. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Тема 1: Теоретические основы метода и техника эксперимента.

Содержание темы:

Классическая и квантовомеханическая модель комбинационного рассеяния. Поляризация в спектрах КР. Резонансные спектры КР. Техника эксперимента.

Раздел 5. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.

Тема 1: Электронные состояния и электронные спектры молекул.

Содержание темы:

Энергия молекулы в заданном электронном состоянии. Волновая функция. Степень вырождения состояния. Мультиплетность состояния. Среднее время жизни электронного состояния.

Орбитальный и спиновый момент количества движения электронов.

Молекулярные и атомные орбитали. Электронные переходы. Классическое представление.

Хромофоры и ауксохромы. Квантовомеханическое представление: $\sigma \rightarrow \sigma^*$, $n \rightarrow \sigma^*$, $n \rightarrow \pi^*$

электронные переходы. Смещение полос поглощения в спектрах: батохромный и гипсохромный сдвиг, гипохромный и гиперхромный эффекты. Колебательная структура электронных спектров.

Электронные переходы. Вибронные переходы. Переходы с переносом заряда. Вероятность переходов. Коэффициент Эйнштейна для самопроизвольного и вынужденного испускания и поглощения. Коэффициент экстинкции.

Тема 2: Возбужденные состояния и спектры люминесценции.

Содержание темы:

Спектры флуоресценции и фосфоресценции. Выход люминесценции.

Тема 3: Техника и применения УФ-спектроскопии.

Содержание темы:

Методики проведения эксперимента. Применения метода.

Тема 4: Фотоэлектронная спектроскопия. Методы ФЭС, РЭС, ОЭС.

Содержание темы:

Теоретические основы методов. Физическая модель эмиссии электронов. Параметры фотоэлектронных спектров. Техника эксперимента. Применения методов.

Раздел 6. Методы радиоспектроскопии магнитного резонанса.

Тема 1: Спектроскопия ЯМР.

Содержание темы:

Спин ядра. Магнитный момент ядра. Ядерный магнетон. Гиромагнитное отношение и ядерный фактор. Условие ЯМР для двухуровневой системы. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие. Гомоядерные и гетероядерные спиновые системы. Химически эквивалентные и неэквивалентные ядра. Мультиплетность сигналов ЯМР. Константа спин-спинового взаимодействия. Релаксационные явления. Времена спин-спиновой и спин-решёточной релаксации.

Тема 2: Спектроскопия ЭПР.

Содержание темы:

Теоретические основы и условия ЭПР. Параметры и структура спектров ЭПР. Фактор Ланде.

Константа СТВ. Тонкая и сверхтонкая структура спектров.

Тема 3: Множественный магнитный резонанс и поляризация спинов.

Содержание темы:

Двойной ЯМР. Методы физической и химической поляризации ядер и электронов.

Тема 4: Техника эксперимента, методики работы с образцами, применения методов.

Содержание темы:

Методики проведения эксперимента. Применения методов.

Раздел 7. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса.

Тема 1: Теоретические основы метода. Спектры ЯКР.

Содержание темы:

Квадрупольные ядра. Электростатическое взаимодействие квадрупольного ядра с электрическим полем. Квадрупольные уровни энергии и переходы. Интерпретация градиента неоднородного электрического поля на ядре. Спектры ЯКР и их приложения. Техника эксперимента и методические особенности.

Тема 2: Техника эксперимента, методики работы с образцами, применения метода.

Содержание темы:

Методики проведения эксперимента. Применения метода.

Содержание практических занятий по дисциплине

Раздел 3. Инфракрасная спектроскопия.

Тема 3: Техника эксперимента. Применения метода.

Практические занятия № 1-10 «Идентификация органических соединений. ИК-спектры основных классов органических соединений».

Раздел 5. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.

Тема 3: Техника и применения УФ-спектроскопии.

Практические занятия № 11-14 «Идентификация органических соединений. Электронные спектры основных классов органических соединений».

Раздел 6. Методы радиоспектроскопии магнитного резонанса.

Тема 4: Техника эксперимента, методики работы с образцами, применения методов.

Практические занятия № 15-18 «Идентификация органических соединений. Спектры ЯМР».

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

Раздел 3. Инфракрасная спектроскопия

Тема 3: Техника эксперимента. Применения метода.

Лабораторная работа № 1 «Идентификация органических соединений с использованием методов молекулярной спектроскопии».

Раздел 5. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.

Тема 3: Техника УФ-спектроскопии.

Лабораторная работа № 2 «Структурные исследования с применением методов молекулярной спектроскопии».

Лабораторная работа № 3 «Количественный анализ с использованием спектроскопии в УФ- и видимой области»

Лабораторная работа № 4 «Идентификация неорганических соединений методом ААС»

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

5.1. Текущий контроль успеваемости

Рейтинг-контроль №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 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.

16. 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.

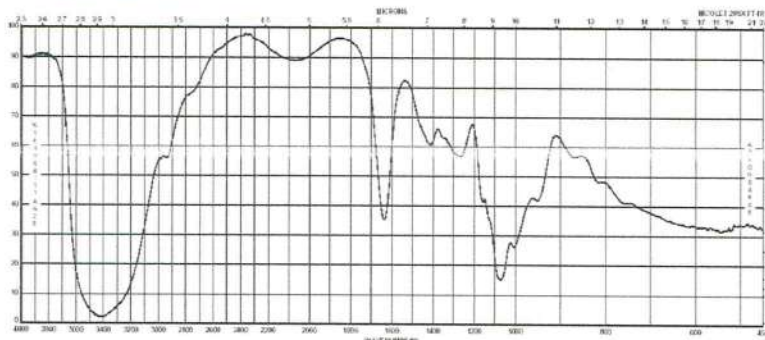
17. Классификация физических методов исследования. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний.

18. 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.

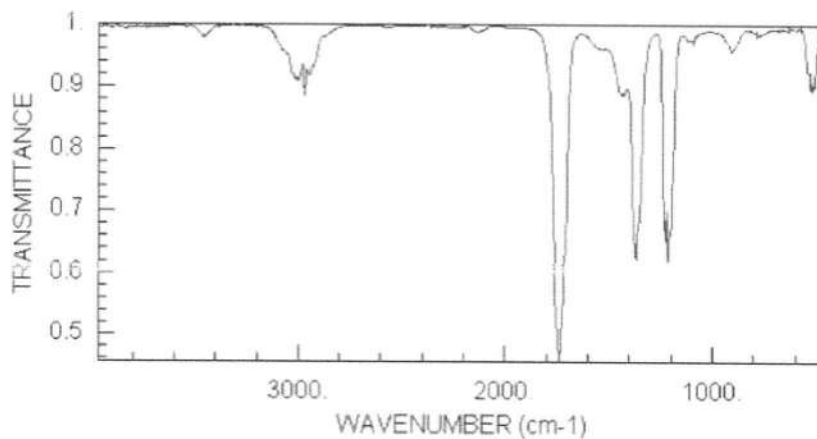
19. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр двухатомных и многоатомных молекул. Фундаментальные, обертоновые, составные частоты и «горячие» полосы.
20. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Вращательная структура ИК-спектров двухатомных и многоатомных молекул. R-, Q-, P- ветвь.
21. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Элементы симметрии молекул. Активность колебаний в ИК-спектрах.
22. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Колебательный ИК-спектр многоатомных молекул. Типы симметрии колебаний. Точечные группы. Их классификация.
23. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Ближняя, средняя и дальняя ИК-область. Техника эксперимента. Классификация спектрометров. Основные преимущества интерференционных Фурье-спектрометров.
24. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Техника эксперимента. Подготовка образцов. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов. Преимущества и недостатки различных способов пробоподготовки.
25. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектров для идентификации соединений. Групповые частоты.
26. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: изменения масс, геометрия, колебательное взаимодействие.
27. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внутренние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: порядок связи, электронные эффекты, ассоциация.
28. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Внешние факторы, оказывающие влияние на групповые частоты: агрегатное состояние, растворитель, концентрация, температура.
29. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектроскопии для идентификации неизвестных веществ.
30. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Возможности использования ИК-спектроскопии для структурного анализа. Особенности использования корреляционных таблиц.
31. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Специальные задачи и методы количественного анализа.

Примеры тестовых заданий:

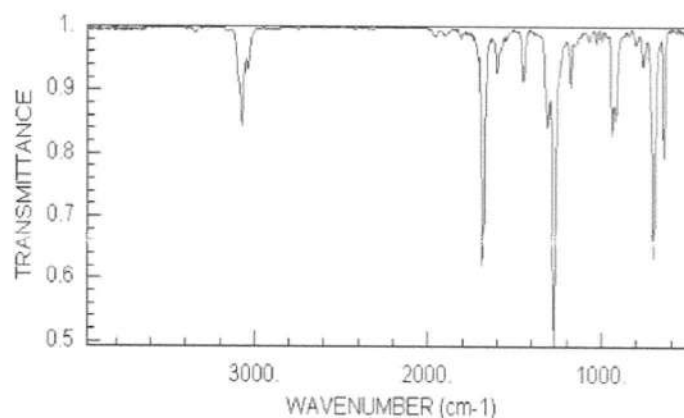
1. ИК-спектр гексена-1 или гексана показывает широкую полосу при 3400 и пики при 1640 и 1080 см^{-1} (дать обоснование правильному ответу).



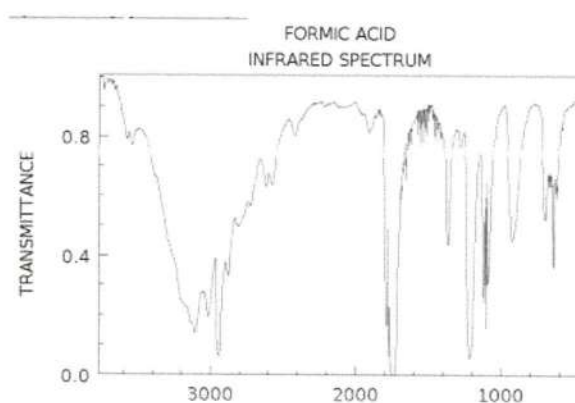
2. ИК-спектр принадлежит соединению, формула которого $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$, его структурная формула ... (дать обоснование принятому решению).



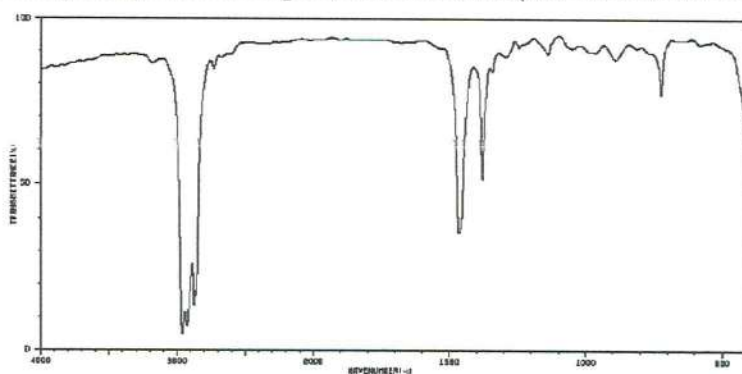
3. ИК-спектр принадлежит чисто ароматическому кетону, его структурная формула (дать обоснование).



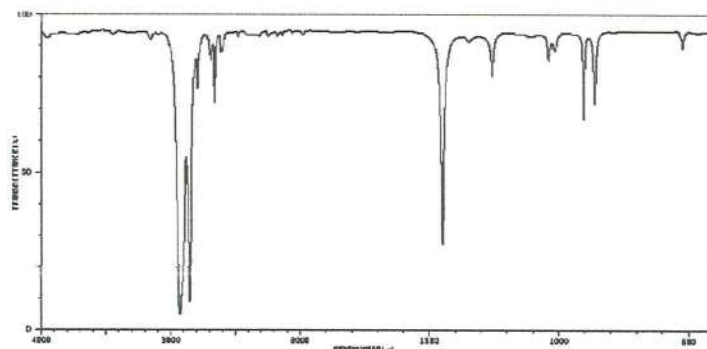
4. ИК-спектр принадлежит соединению формулой CH_2O_2 , его структурная формула ... (дать обоснование принятому решению).



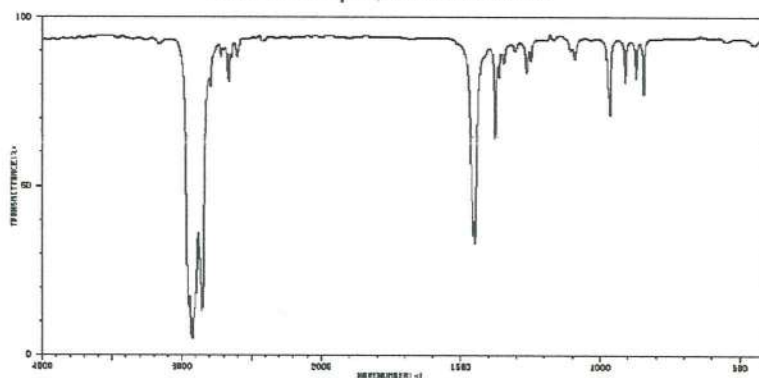
5. Валентных колебаний связи С-Н в области ... см^{-1} присутствует в спектрах гексана и метилциклогексана, но отсутствует в спектре циклогексана (дать объяснение).



ИК-спектр n-гексана



ИК-спектр циклогексана



ИК-спектр метилциклогексана

Рейтинг-контроль №2:

1. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Классическая модель комбинационного рассеяния.
2. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Квантовомеханическая модель комбинационного рассеяния. Возможность определения симметрии молекулы на основе данных ИК- и КР- спектроскопии.
3. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Поляризация в спектрах КР. Поляризованные линии в спектре поглощения. Степень деполяризации, ее взаимосвязь с симметрией молекулы.
4. Спектроскопические методы. КР-спектроскопия. Резонансное комбинационное рассеяние.
5. Спектроскопические методы. Возможность проведения структурного анализа на основе данных ИК- спектроскопии и спектроскопии КР.
6. Спектроскопические методы. Идентификация соединений на основе данных ИК-спектроскопии и спектроскопии КР.
7. Спектроскопические методы. Спектроскопия КР и ИК-спектроскопия. Общее и различия.
8. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Энергия молекулы в заданном электронном состоянии. Волновая функция. Степень вырождения состояния. Мультиплетность состояния. Среднее время жизни электронного состояния.
9. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Орбитальный и спиновый момент количества движения электронов.
10. Электронные спектры молекул. Электронное состояние молекул. Волновая функция. Молекулярные и атомные орбитали. Волновая функция и операции симметрии.

11. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Классическое представление. Хромофоры и ауксохромы.
14. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Квантовомеханическое представление. $\sigma \rightarrow \sigma^*$, $n \rightarrow \sigma^*$, $n \rightarrow \pi^*$ электронные переходы. Смещение полос поглощения в спектрах: батохромный и гипсохромный сдвиг, гипсохромный и гиперхромный эффекты.
15. Электронные спектры молекул. Колебательная структура электронных спектров. Электронные переходы. Вибронные переходы. Переходы с переносом заряда.
16. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Вероятность переходов. Коэффициент Эйнштейна для самопроизвольного и вынужденного испускания и поглощения. Коэффициент экстинкции.
17. Электронные спектры молекул. Электронные переходы. Правила отбора.
18. Электронные спектры молекул. Спектры флуоресценции и фосфоресценции. Выход люминесценции.
19. Электронные спектры молекул. Возможности использования методов электронной спектроскопии для идентификации соединений и определения их структуры. Количественный анализ в УФ-спектроскопии.

Примеры тестовых заданий:

1. По мере увеличения числа сопряженных двойных связей поглощение все более сдвигается в сторону длинных волн. Соединения А, Б, В имеют формулу C_5H_8 и при гидрировании они превращаются в н-пентан. В их УФ-спектрах имеются следующие максимумы: А – 176 нм, Б – 211 нм, В – 217 нм.

Вероятная формула соединения В ...?

Варианты ответов:

1. Пентан.
2. 2-метилбутадиен-1,3.
3. Пентен-1.
4. Пентен-2.

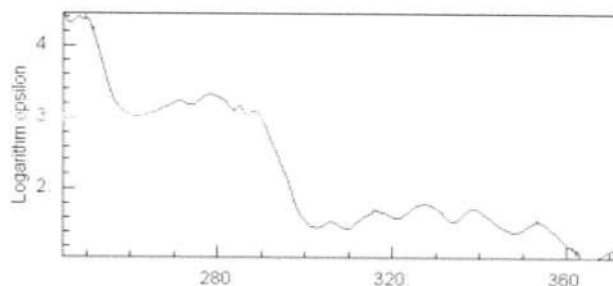
2. Полоса переноса заряда для изомеров о, м, п-диметиламинобензальдегида находится в области 327, 262, 262 нм. Мезо-форма для изомера с полосой переноса заряда в 327 нм имеет вид ...

3. В спектре метиламина полосам поглощения равным 173 нм и 213 нм соответствуют переходы ...

4. ... эффект обуславливает смещение полосы $n \rightarrow \sigma^*$ триэтиламина батохромно (217 нм) по сравнению с метиламином.

5. Наиболее характерным поглощением для бензола является полоса в области ... нм с ярко выраженной колебательной структурой.

6. Классификация полос поглощения в молекуле ацетона ...



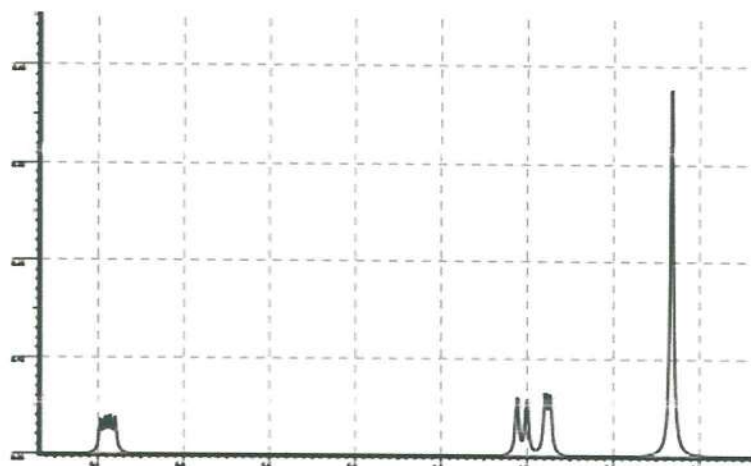
Рейтинг-контроль № 3:

1. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин ядра. Магнитный момент ядра. Ядерный магнетон. Гиромагнитное отношение и ядерный фактор. Условие ЯМР для двухуровневой системы.
2. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР.
3. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие. Гомоядерные и гетероядерные спиновые системы. Химически эквивалентные и неэквивалентные ядра. Мультиплетность сигналов ЯМР.
4. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие. Константа спин-спинового взаимодействия.
5. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Возможности использования ЯМР в структурных исследованиях.
6. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. 2D-ЯМР.
7. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Множественный магнитный резонанс.
8. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Техника эксперимента и методики работы с образцами.
9. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Спектры ЯМР первого порядка. Особенности работы со спектрами ЯМР порядка выше первого.
10. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Факторы, оказывающие влияние на его величину.
11. Радиоспектроскопические методы. ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Фактор Ланде. Константа СТВ.
12. Использование методов радиоспектроскопии магнитного резонанса в фундаментальных и прикладных исследованиях.
13. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса. Теоретические основы метода. Квадрупольные уровни энергии и переходы.
14. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса. Спектры ЯКР.
15. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса. Частота, интенсивность, ширина и мультиплетность сигнала в спектрах ЯКР.
16. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса. Методические особенности проведения эксперимента.
17. Использование спектроскопии ЯКР при решении структурных задач.
18. Мессбауровская спектроскопия. Основы теории метода. Взаимодействие ядер с γ -квантом. Ядерный γ -резонанс. Эффект Мессбауэра. Условия, необходимые для наблюдения эффекта Мессбауэра.
19. Мессбауровская спектроскопия. Радиоактивный распад с образованием мессбауровских атомов. Параметры спектров. Энергия ядерного перехода. Влияние окружения на энергию ядерного перехода. Изомерный сдвиг.
20. Мессбауровская спектроскопия. Энергетические уровни и переходы при наличии на ядре градиента электрического поля. Квадрупольное расщепление энергетических уровней. Тонкая мультиплетная структура сигналов в спектрах ЯГР.
21. Мессбауровская спектроскопия. Зеемановское расщепление ядерных спиновых состояний при действии внешнего магнитного поля. Сверхтонкая структура магнитных взаимодействий.
22. Применение метода ЯГР в химии. Эмпирические корреляции и структурные исследования.

Примеры тестовых заданий:

1. Три изомерных формы диметилциклопропана дают соответственно два, три и четыре сигнала в спектр ЯМР. Пространственные формулы изомеров, дающих эти сигналы ...
2. В ЯМР-спектре двух изомеров формулы $C_2H_4Cl_2$ сигналов ... (напишите структурные формулы и обозначьте каждую группу эквивалентных протонов, укажите число сигналов для каждого изомера).
3. В ЯМР спектре циклогексана сигналов ...

4. В ЯМР-спектре этилбензола и п-ксилола число сигналов ... (напишите структурные формулы и обозначьте каждую группу эквивалентных протонов).
5. ЯМР-спектр соединения, расшифровка сигналов ...



5.2. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины

Контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации (экзамена):

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 ауксохромы.
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. Охарактеризуйте возможности использования методов молекулярной спектроскопии при проведении фундаментальных исследований.
28. Дайте сравнительную оценку и охарактеризуйте возможности использования рассмотренных методов молекулярной спектроскопии при проведении прикладных идентификационных исследований.
29. Дайте сравнительную оценку и охарактеризуйте возможности использования рассмотренных методов молекулярной спектроскопии при проведении прикладных структурных исследований.
30. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Теоретические основы метода. Спин ядра. Магнитный момент ядра. Ядерный магнетон. Гиромагнитное отношение и ядерный фактор. Условие ЯМР для двухуровневой системы. Химический сдвиг сигналов ЯМР.

31. Радиоспектроскопические методы. ЯМР. Теоретические основы метода. Спин-спиновое взаимодействие. Гомоядерные и гетероядерные спиновые системы. Химически эквивалентные и неэквивалентные ядра. Мультиплетность сигналов ЯМР.
32. Основные методики ЯМР-спектроскопии: динамический ЯМР, 2D ЯМР, множественный магнитный резонанс.
33. Использование ЯМР-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.
34. Радиоспектроскопические методы. ЭПР. Теоретические основы метода. Параметры спектров ЭПР. Фактор Ланде. Константа СТВ.
35. Использование ЭПР-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении практических задач.
36. Радиоспектроскопические методы. ЭПР. Расщепление спиновых энергетических уровней электрона. Параметры и структура спектров. Тонкая и сверхтонкая структура спектров.
37. Радиоспектроскопические методы. Методы физической поляризации ядерных и электронных спинов. Химическая поляризация ядер и электронов.
38. Спектроскопия ядерного квадрупольного резонанса. Теоретические основы метода. Квадрупольные уровни энергии и переходы. Спектры ЯКР.
39. Использование спектроскопии ЯКР при решении структурных задач.
40. Мессбауровская спектроскопия. Основы теории метода. Взаимодействие ядер с γ -квантом. Ядерный γ -резонанс. Эффект Мессбауэра. Условия, необходимые для наблюдения эффекта Мессбауэра.
41. Мессбауровская спектроскопия. Радиоактивный распад с образованием мессбауровских атомов. Параметры спектров. Энергия ядерного перехода. Влияние окружения на энергию ядерного перехода. Изомерный сдвиг.
42. Мессбауровская спектроскопия. Энергетические уровни и переходы при наличии на ядре градиента электрического поля. Квадрупольное расщепление энергетических уровней. Тонкая мультиплетная структура сигналов в спектрах ЯГР.
43. Мессбауровская спектроскопия. Зеемановское расщепление ядерных спиновых состояний при действии внешнего магнитного поля. Сверхтонкая структура магнитных взаимодействий.
44. Применение метода ЯГР в химии. Эмпирические корреляции и структурные исследования.

5.3. Самостоятельная работа обучающегося

Вопросы для проведения контроля самостоятельной работы:

1. Применение МВ- спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
2. Применение ИК- спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
3. Применение КР- спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
4. Применение спектроскопии в видимой области при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
5. Применение спектроскопии УФ-спектроскопии при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
6. Применение методов ЯМР при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
7. Применение ЭПР при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.
8. Применение ЯКР при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.

9. Применение ЯГР при проведении фундаментальных исследований и решении прикладных задач.

Контрольные вопросы п. 5.3. включены в перечень вопросов для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Примерные темы курсовых работ:

1. Применение метода X в фундаментальных исследованиях.
2. Применение метода X в прикладных исследованиях.

Фонд оценочных материалов для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронном каталоге ЭБС
Основная литература		
Сергеев Н.А., Рябушкин Д.С. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса. М: ЛОГОС.	2017	https://www.studentlibrary.ru/ru/book/ISBN9785987047545.html
Криштафович В.И., Криштафович Д.В. Физико-химические методы исследования. М.: ДАШКОВ и К.	2015	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785394004124.html
Смирнова Н.Н., Чухланов В.Ю. Инфракрасная спектроскопия в химии высокомолекулярных соединений. Владимир: ВлГУ.	2021	50 печ. экз. в библиотеке ВлГУ
Амелин В.Г. Спектроскопические методы анализа: практикум. Владимир: ВлГУ.	2008	75 печ. экз. в библиотеке ВлГУ
Дополнительная литература		
Ярышев Н.Г., Ю. Н. Медведев Ю.Н., Токарев М.И., Бурихина А.В., Камкин Н.Н. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе: учебное пособие. М: ПРОМЕТЕЙ.	2015	https://www.studentlibrary.ru/ru/book/ISBN9785990613461.html
Другов Ю.С., Родин А.А. Мониторинг органических загрязнений природной среды. 500 методик: практическое руководство. М: БИНОМ.	2020	https://znanium.com/catalog/document?id=358488
Другов Ю.С., Родин А.А. Экологический анализ при разливах нефти и НП. М: БИНОМ. Лаборатория знаний.	2020	http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=544910

Луков В.В., Щербаков И.Н. Физические методы исследования в химии: Учебное пособие. Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет.	2016	https://znanium.com/catalog/document?id=327152
---	------	---

6.2. Периодические издания

Журналы:

«Успехи химии»

«Химия и химическая технология»

«Биомедицинская химия»


6.3. Интернет-ресурсы.

1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
3. <http://www.anchem.ru/literature/>
4. <http://www.sciencedirect.com>
5. <http://chemteq.ru/lib/book>
6. <http://www.chem.msu.su/rus>
7. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
8. <http://www.elsevier.com/>
9. <http://www.uspkhim.ru/>
10. <http://www.strf.ru/database.aspx>

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий лабораторного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы. Лабораторные работы проводятся в лаборатории кафедры химии ВлГУ.

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

Рабочую программу составил  д.х.н. профессор кафедры химии Смирнова Н.Н.

Рецензент  к.т.н. генеральный директор ООО «БМТ» Поворов А.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 14 от 23 июня 2022 года

Заведующий кафедрой  /Смирнова Н.Н./

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

Протокол № 14 от 23 июня 2022 года

Председатель комиссии  /Смирнова Н.Н./

(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

