



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДВФУ)

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

«СОГЛАСОВАНО»

Руководитель ОП

  
(подпись) Короченцев В.В.  
(Ф.И.О. рук.ОП)  
«1» сентября 2016 г.

«УТВЕРЖДАЮ»

Заведующий кафедрой теоретической и  
ядерной физики  
  
(подпись) Ширновский С.Э.  
(Ф.И.О. зав. каф.)  
«1» сентября 2016 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

«Физические практикум по спектроскопии»

Направление подготовки 03.03.02 Физика

**Форма подготовки очная**

курс 3 семестр 6  
лекции 18 час.  
практические занятия 0 час.  
лабораторные работы 72 час.  
в числе с использованием МАО лек. 0 /пр.0 /лаб. 0 час.  
всего часов аудиторной нагрузки 90 час.  
в том числе с использованием МАО 0 час.  
самостоятельная работа 18 час.  
курсовая работа / курсовой проект нет семестр  
зачет 6 семестр  
экзамен не предусмотрен

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно установленного ДВФУ, утвержденного приказом ректора от 07.07.2015 № 1282.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры теоретической и ядерной физики, протокол № 23 от «1» сентября 2016 г.

Заведующий кафедрой: Ширновский С.Э., к.ф.-м. н., доцент

Составитель (ли): к. ф.-м. н., доцент Голик С.А.

## Оборотная сторона титульного листа РПУД

### I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

### II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

## ABSTRACT

**Specialist's/Master's degree in 14.03.02 Nuclear physics and technologies**

**Course title:** Physical Workshop on Spectroscopy

**Variable part of block, 3 credits.**

**Instructor:**

**At the beginning of the course a student should be able to:**

This discipline is an integral part of the basic part of general professional disciplines. The course methodology assumes a close relationship with other disciplines: inorganic, organic, physical chemistry, quantum mechanics, and mathematics. To successfully master the discipline, the student should know the fundamental sections of physics and mathematics, the basics of using computers, be able to use computer software for mathematical calculations and processing experimental data, know the theoretical foundations of inorganic, organic, physical and analytical chemistry, the structure of matter.

**Learning outcomes:**

with the ability to conduct scientific research in the chosen field of experimental and (or) theoretical physical research using modern instrumentation base (including sophisticated physical equipment) and information technology, taking into account domestic and foreign experience

with the ability to operate and maintain modern physical equipment and equipment the ability to critically rethink the accumulated experience, change, if necessary, the direction of its activities

ability to gain organizational and managerial skills when working in scientific groups and other small teams of performers

**Course description:**

The development of chemistry is impossible without widespread use in chemical research of the achievements of physics and its new methods.

The interpenetration of chemistry and physics is of great importance for the development of the natural sciences and contributes to their mutual enrichment.

The arsenal of modern physical methods in chemistry is so extensive and their application is so diverse that a systematic study of theoretical principles and their practical use is required. The objectives of mastering the discipline "Physical Methods of Spectroscopy" are students' mastering the methodology of various physical methods for researching chemical compounds and mastering practical skills in using methods available to a wide range of researchers, as well as acquaintance with less commonly used but very important for physics methods of obtaining information about the structure of molecules.

Goals:

□ providing vocational education that promotes social and academic mobility of students, their relevance in the labor market, a successful career;  
formation of a holistic view of physical phenomena and processes;

□ preparation of bachelor to master the basic methods of observation and measurement, as well as to use theoretical knowledge for further teaching of specialization disciplines and for practical purposes.

Tasks:

□ report the basic principles and laws of physics and their mathematical expression applied to the main models of the discipline "Physical methods of spectroscopy";

Familiarize yourself with the main physical phenomena, their methods observation and experimental research;

### **Main course literature:**

1. Vilkov L.V. Physical research methods in chemistry. - M.: Mir, 2006.
2. Physical methods for the study of inorganic substances. Under the editorship of Nikolsky AB - M.: Academy, 2006.
3. Vilkov L.V., Pentin Yu.A. Physical research methods in chemistry. Structural methods and optical spectroscopy. -M.: Higher. shk., 1987.
4. Vilkov L.V., Pentin Yu.A. Physical research methods in chemistry. resonance and electro-optical methods.- M.: Higher. shk., 1989.
5. R. Drago. Physical methods in chemistry. V. 1, V. 2. - M.: Mir, 1981.
6. Ioffe B.B., Kostikov R.R., Razin V.V. Physical methods for determining the structure of organic compounds. - M.: Higher. shk., 1984.
7. Kazitsyna LA, Kupletskaya N.B. The use of UV, IR, NMR spectroscopy in organic chemistry.-M.: Higher. shk., 1971.
8. Benue K. Basics of molecular spectroscopy. - M.: 1985.

### **Additional literature**

1. Wheatley P. Determination of molecular structure. - M.: Mir, 1970.
2. Huey J. Inorganic chemistry. Structure and reactivity. - M.: Chemistry, 1987.
3. Carrington A., Mac-Lechlan E. Magnetic resonance and its application in chemistry. -M.: Mir, 1970.
4. Ionin B.I., Ershov B.A. NMR - spectroscopy in organic chemistry. -L.: Chemistry, 1967.
5. Tyulin V.I. Vibrational and rotational spectra of polyatomic molecules. - M.: Izd-vo Mosk. Un-ta, 1987.
6. Ioffe B.V. Refractometric methods of chemistry. -L.: Chemistry, 1974.
7. Blumih B. Fundamentals of NMR. - M.: Technosphere, 2007.

**Form of final knowledge control:** pass-fail exam.

## АННОТАЦИЯ

Рабочая программа дисциплины «Физические практикум по спектроскопии» разработана для студентов 3 курса направления 03.03.02 «Физика», специализации «Физика» в соответствии с требованиями ОС ВО по данному направлению.

Дисциплина «Физические практикум по спектроскопии» относится к разделу Б1.В.ДВ.9 дисциплин по выбору учебного плана.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов. Учебным планом предусмотрены лекционные занятия (18 час.), лабораторные (72 час.), самостоятельная работа (18 час.). Дисциплина реализуется в 6 семестре 3 курса.

Развитие химии невозможно без широкого использования в химических исследованиях достижений физики и её новых методов. Взаимопроникновение химии и физики имеет большое значение для развития естественных наук и способствует их взаимному обогащению. Арсенал современных физических методов в химии настолько обширен и применение их настолько разнообразно, что требуется систематическое изучение теоретических принципов и их практическое использование. Целями освоения дисциплины «Физические методы спектроскопии» являются освоение студентами методологии различных физических методов исследований химических соединений и овладение практическими навыками использования методов, доступных широкому кругу исследователей, а также знакомство с реже применяющимися, но весьма важными для физики методами получения сведений о строении молекул.

Данная дисциплина является неотъемлемой составляющей базовой части общепрофессиональных дисциплин. Методология курса предполагает тесную связь с другими дисциплинами: неорганической, органической, физической химией, квантовой механикой, математикой. Для успешного освоения дисциплины обучающийся 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.

### **Цели:**

– обеспечение профессионального образования, способствующего социальной, академической мобильности обучающихся, востребованности их на рынке труда, успешной карьере;

формирование целостного представления о физических явлениях и процессах;

–подготовка бакалавра к освоению основных методов наблюдения и измерения, а также к использованию теоретических знаний для дальнейшего изучения дисциплин специализации и в практических целях.

**Задачи:**

–сообщить основные принципы и законы физики и их математическое выражение в применении к основным моделям дисциплины «Физические методы спектроскопии»;

–ознакомить с основными физическими явлениями, методами их наблюдения и экспериментального исследования;

–сформировать определенные навыки работы с учебной и научной литературой, научить правильно выражать физические идеи, количественно формулировать и решать физические задачи по ядерной физике, оценивать порядки физических величин;

–дать студенту ясное представление о границах применимости физических моделей и гипотез.

Для успешного изучения дисциплины «Физические методы спектроскопии» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- готовность к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства (ОК-6);

В результате изучения данной дисциплины у студентов формируются следующие общекультурные/ общепрофессиональные/ профессиональные компетенции (элементы компетенций).

| Код и формулировка компетенции  | Этапы формирования компетенции |   |
|---|--------------------------------|---|
| ПК-2 способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта | Знает                          | - Как проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований<br>- теоретические основы физических методов изучения и исследования молекул и химических реакций.<br>- теоретические основы современной лазерной спектроскопии, включая квантовую теорию поглощения, испускания и рассеяния света, основы лазерной физики и свойства лазерного излучения; |
|   |                                | Умеет   |

|  |                |  |
|--|----------------|--|
| <p>ОПК-8 способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности</p>             |                | <p>- Проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований<br/>- объяснять физические явления и процессы, лежащие в основе методов лазерной спектроскопии, оценивать возможности различных методов лазерной спектроскопии</p>   |
| <p>ОПК-9 способностью получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей</p> | <p>Владеет</p> | <p>Методами проведения физических экспериментов, составления отчетов и анализу результатов.<br/>- методами расчета характеристик молекул и физико-химических процессов, приемами экспериментальной деятельности для определения физико-химических величин и структуры вещества<br/>- практическими навыками проведения спектроскопических измерений и обработки их результатов</p> |

## I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА.

**Лекционные занятия (18 час)**

1. Введение в предмет
2. Электронная спектроскопия сложных молекул.
3. Колебательная спектроскопия.
4. Вращательная спектроскопия.
5. Колебательно-вращательная спектроскопия.
6. Рефрактометрия.
7. Спектроскопия в радиочастотной области.
8. Метод ядерного гамма-резонанса.
9. Масс-спектрометрия. Спектроскопия в области рентгеновского излучения.

## II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

## **Лабораторные работы (72 час)**

Студенты самостоятельно готовятся к проведению лабораторных работ и их защите с использованием методических пособий по выполнению лабораторных работ. Примерные вопросы к защите лабораторных работ даны в соответствующих методических пособиях.

1. Термодинамический масс-спектрометрический эксперимент.
2. Методы исследования ион-молекулярных реакций.
3. Спектроскопия ион-циклотронного резонанса.
4. Рефрактометрия.
5.  $\gamma$  – резонансная спектроскопия
6. Метод электрического резонанса.
7. Теоретические основы и области применения ЭПР – спектроскопии.
8. Теоретические основы и области применения метода ЯМР.
9. Сравнительные характеристики методов UV-VIS - и ИК – спектроскопии.
10. Теоретические основы области применения оже - спектроскопии.

### **III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

В качестве самостоятельной работы студентов предусмотрены выполнения индивидуальных заданий по всем разделам дисциплины. Определены сроки сдачи отдельных модулей.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Экспериментальные методы ядерной физики» включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- характеристика заданий для самостоятельной работы студентов и методические рекомендации по их выполнению;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

#### IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

| № | Наименование раздела дисциплины            | Содержание раздела дисциплины   | Результат обучения, формируемые компетенции   |
|---|--|---|---|
| 1 | Введение в предмет                         | Шкала электромагнитного излучения. Физические явления, на которых основаны методы исследования – поглощение излучения, испускание, рассеивание, отражение, преломление и другие. «Физические методы исследования»- интегративная учебная дисциплина. Краткая история развития методов, Классификация физических методов по характеру взаимодействия вещества с излучением. Общие принципы использования различных методов. Спектральные и неспектральные методы. Понятие спектра. Различие возможностей методов в решении исследовательских задач. Прямая и обратная задачи.  | Знать общие принципы спектроскопии<br>ПК-3<br>ПК-4  |
| 2 | Электронная спектроскопия сложных молекул. | Характеристики электронных спектров- энергия перехода, интенсивность, ширина и форма полосы поглощения. Правила отбора. 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. Типы электронных переходов в спектрах органических молекул. Хромофоры и ауксохромы. Обзор спектров различных классов соединений. Объяснение спектров комплексных соединений с позиций теории кристаллического поля /ТКП/. Основные положения ТКП. Действие лигандов на энергетические состояния 3d- орбиталей. Спектрохимический ряд лигандов. Три типа диаграмм Оргела, примеры их использования. Обзор спектров комплексных соединений 3d – металлов. Сравнение теорий кристаллического поля и МО ЛКАО. | Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4 |
| 3 | Колебательная спектроскопия.               | Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебание гармонического осциллятора с позиции классической механики.: вывод уравнения потенциальной кривой, частоты колебания. Силовая постоянная связи. Результат квантово-механического рассмотрения: уравнение стационарных состояний; колебательное квантовое число; правило отбора ; предполагаемый спектр гармонического осциллятора. Учёт ангармоничности колебаний . Кривая Морзе. Основные колебательные переходы и обер тона, их интенсивности и энергии. Расчёт постоянной ангармоничности. «Горячие» полосы. Колебания многоатомной молекулы. Классификация нормальных колебаний по форме и   | Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4 |

|   |  |   |   |
|---|--|---|---|
|   |  | <p>симметрии. Характеристичность колебаний. Отклонение от характеристичности по частоте - мера изменения свойств данной группы атомов. Причины усложнения экспериментальных ИК- спектров – влияние физического состояния образца, растворителя, полиморфизма. Внутри- и межмолекулярных взаимодействий, резонансного взаимодействия колебаний; изотопозамещение. Принципиальная схема ИК – спектрофотометра. Приготовление образцов, Интерпретация спектров. Дальняя и ближняя ИК-области в химических исследованиях. 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. ИК – и КРС – спектроскопия – взаимно дополняющие методы исследования строения молекул.</p> |   |
| 4 | Вращательная спектроскопия.              | <p>Условия применения микроволновой спектроскопии. Модель жёсткого ротатора. Момент инерции. Уравнение энергии вращательного уровня. Вращательное квантовое число. Набор энергетических состояний. Правила отбора. Вращательная постоянная. Вид вращательного спектра двухатомной молекулы. Нежесткий ротатор. Постоянная центробежного растяжения, её связь с силовой постоянной связи. Вращательные спектры многоатомных молекул. Линейные молекулы. Молекулы типа сферического, симметричного, асимметричного волчка. Расчет энергетических состояний симметричного волчка. Понятие эффекта Штарка.</p>  | <p>Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований в микроволновой области спектра<br/>ПК-3<br/>ПК-4</p> |
| 5 | Колебательно-вращательная спектроскопия. | <p>Параллельные и перпендикулярные колебания многоатомных молекул. Колебательно-вращательные уровни, их энергетическая диаграмма. Правила отбора. Структура P, Q, R- ветвей в спектрах молекул различной симметрии.</p>   | <p>Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br/>ПК-3<br/>ПК-4</p>                                |

|   |  |   |  |
|---|--|---|--|
| 6 | Рефрактометрия.  | Понятие показателя преломления света. Относительный, абсолютный показатель преломления. Зависимость от плотности, поляризуемости молекулы, от температуры, давления, состава растворов, длины волны света. Относительная, средняя, удельная дисперсия. Принципиальная схема рефрактометра типа Аббе. Удельная и молярная рефракции. Групповые, связевые, атомные рефракции, структурные инкременты. Вычисление рефракции по аддитивной схеме. Экзальтация молекулярной рефракции. Определение структуры органических соединений по молекулярной рефракции и дисперсии. Вычисление рефракции растворенного вещества.   | ПК-3<br>ПК-4   |
| 7 | Спектроскопия в радиочастотной области.                    | Метод электронного парамагнитного резонанса. Спиновый и магнитный моменты электрона. Эффект Зеемана для неспаренного электрона. Элементарный магнитный резонанс. Основное уравнение ЭПР, правила отбора и условия получения спектров ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие и его проявление в спектре ЭПР. Применение метода ЭПР в химии. Идентификация и определение концентрации парамагнитных молекул, изучение механизма и кинетики химических реакций. Метод ядерного магнитного резонанса. Физические основы метода. Условие ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие ядер. Анализ спектров ЯМР. Протонный магнитный резонанс и его применение в органической химии, достоинства и недостатки метода. ЯМР других магнитных ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР. | Знать квантовомеханические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований ЭПР.<br>ПК-3<br>ПК-4 |
| 8 | Метод ядерного гамма-резонанса.                            | Эффект Мессбауэра. Доплеровское уширение линий и энергия отдачи. Получение гамма-резонансных спектров. Возможности применения гамма-резонансной спектроскопии в химии.  | Знать квантовомеханические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4     |
| 9 | Масс-спектрометрия. Спектроскопия в области рентгеновского | Физические основы метода. Принципиальная схема масс-спектрометра. Методы ионизации. Типы ионов в масс-спектрах, разделение и регистрация ионов. Ионная область и разрешающая способность масс-  | Знать теорию строения вещества. Уметь интерпретировать   |

|  |           |  |   |
|--|-----------|--|---|
|  | излучения | спектрометра, применение метода. 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. | экспериментальные результаты. Владеть методами математической обработки экспериментальных данных.<br>ПК-3<br>ПК-4 |
|--|-----------|--|---|

## V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная литература

1. Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, 2006.
2. Физические методы исследования неорганических веществ. Под ред. Никольского А.Б. – М.: Академия, 2006.
3. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. – М.: Высш. шк., 1987.
4. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. резонансные и электрооптические методы. – М.: Высш. шк., 1989.
5. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981.
6. Иоффе Б.Б., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. – М.: Высш. шк., 1984.
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.

### Дополнительная литература

1. Уитли П. Определение молекулярной структуры. – М.: Мир, 1970.
2. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение и реакционная способность. – М.: Химия, 1987.
3. Каррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. – М.: Мир, 1970.
4. Ионин Б.И., Ершов Б.А. ЯМР – спектроскопия в органической химии. – Л.: Химия, 1967.
5. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
6. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. – Л.: Химия, 1974.
7. Блюмих Б. Основы ЯМР. – М.: Техносфера, 2007.

## **VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

- Эффективное изучение курса предполагает регулярное посещение занятий и систематическое повторение материала, излагаемого преподавателем на лекции;
- Алгоритм изучения данной дисциплины состоит в методическом изучении материала курса его регулярном повторении в часы самостоятельной работы, а так же посещение консультаций с преподавателем;
- Работа с указанной литературой должна осуществляться прежде всего в рамках лекционного курса;
- Подготовка к зачёту и экзамену должна проходить регулярно в течении семестров отведённых для занятий.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДВФУ)

---

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ  
РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

**«Физический практикум по спектроскопии»  
Направление подготовки 03.03.02 Физика**

**Форма подготовки очная**

**Владивосток  
2016**

## **МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ).**

Самостоятельная работа выполняется по заданию преподавателя в аудитории или вне аудитории. Обучающемуся необходимо: – выполнять все задания, выносимые преподавателем для самостоятельной работы; – активно работать с учебной литературой; – выносить на текущие консультации все неясные вопросы; – подготовку к экзамену проводить по экзаменационным теоретическим вопросам, предоставленным лектором; – при подготовке к экзамену все неясные моменты необходимо фиксировать и выносить на предэкзаменационную консультацию.

## **МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ.**

Студенту необходимо научиться четко конспектировать излагаемый на лекции материал – выделять темы разделов, подзаголовки, рисовать графики в хорошем масштабе, так как это позволит лучше подготовиться к экзамену. Изучение курса надо начинать с первой же недели занятий, так как из-за большого объема изучаемый материал преподается очень сжато. Материал, излагаемый в начале курса, постоянно используется в течение всего курса и последующего изучения специальных дисциплин.

### **Рекомендации по освоению дисциплины на лекционных занятиях:**

- перед очередной лекцией необходимо просмотреть по конспекту и рекомендованной учебной литературе материал предыдущей лекции;
- бегло ознакомиться с содержанием очередной лекции по основным источникам литературы в соответствии с рабочей программой дисциплины;
- при затруднениях необходимо обратиться к лектору по графику его консультаций или на практических занятиях. **Рекомендации по освоению дисциплины на практических занятиях:**
- на занятия носить конспект лекций и рекомендованный сборник задач;
- до очередного практического занятия по конспекту и рекомендованной учебной литературе проработать теоретический материал, соответствующий теме занятия;
- в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения в понимании и освоении при решении задач, заданных для самостоятельного решения. **Рекомендации по освоению дисциплины на лабораторных занятиях:**

- руководствоваться графиком лабораторных работ;
- накануне перед очередной работой необходимо по конспекту или в методических указаниях к работе просмотреть теоретический материал работы;

- на лабораторном занятии, выполнив все опыты и расчеты, необходимо проанализировать окончательные результаты и убедиться в их достоверности;
- обратить внимание на оформление отчета, в котором должны присутствовать: цель работы, схема установки, методика измерений, результаты опытных и расчетных данных, необходимые графические зависимости и их анализ, выводы;
- при подготовке к защите отчета руководствоваться вопросами, приведенными в методических указаниях к данной работе. Для успешной сдачи экзамена студенты должны регулярно работать в соответствии с графиком организации аудиторной и самостоятельной работы:
  - а) отработать пропущенные по уважительной причине работы в течение семестра;
  - б) вовремя сдавать индивидуальные задания и отчеты по проделанным лабораторным работам, помнить, что неотработанные темы лекций и практических занятий выносятся на экзамен.



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДФУ)

---

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

«Физический практикум по спектроскопии»  
Направление подготовки **03.03.02 Физика**

**Форма подготовки очная**

**Владивосток**  
**2016**

## Паспорт ФОС

| Код и формулировка компетенции   | Этапы формирования компетенции |  |
|--|--------------------------------|--|
| <p>ПК-2 способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта</p> | Знает                          | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Как проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований</li> <li>- теоретические основы физических методов изучения и исследования молекул и химических реакций.</li> <li>- теоретические основы современной лазерной спектроскопии, включая квантовую теорию поглощения, испускания и рассеяния света, основы лазерной физики и свойства лазерного излучения;</li> </ul>  |
| <p>ПК-3 способностью эксплуатировать и обслуживать современную физическую аппаратуру и оборудование</p> <p>ОПК-8 способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности</p>   | Умеет                          | <ul style="list-style-type: none"> <li>- применять освоенные физические методы исследования для определения строения молекул, изучения химических реакций</li> <li>интерпретировать экспериментальные результаты;</li> <li>- Проводить физические эксперименты, составлять описание проводимых исследований</li> <li>- объяснять физические явления и процессы, лежащие в основе методов лазерной спектроскопии, оценивать возможности различных методов лазерной спектроскопии</li> </ul> |
| <p>ОПК-9 способностью получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей</p>   | Владеет                        | <p>Методами проведения физических экспериментов, составления отчетов и анализу результатов.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- методами расчета характеристик молекул и физико-химических процессов, приемами экспериментальной деятельности для определения физико-химических величин и структуры вещества</li> <li>- практическими навыками проведения спектроскопических измерений и об-работки их результатов</li> </ul>   |

| № | Наименование раздела дисциплины | Содержание раздела дисциплины  | Результат обучения, формируемые компетенции |
|---|---------------------------------|--|---|
| 1 | Введение в предмет              | Шкала электромагнитного излучения. Физические явления, на которых основаны методы исследования | Знать общие принципы                        |

|   |  |  |   |
|---|--|--|---|
|   |  | – поглощение излучения, испускание, рассеивание, отражение, преломление и другие. «Физические методы исследования»- интегративная учебная дисциплина. Краткая история развития методов, Классификация физических методов по характеру взаимодействия вещества с излучением. Общие принципы использования различных методов. Спектральные и неспектральные методы. Понятие спектра. Различие возможностей методов в решении исследовательских задач. Прямая и обратная задачи.  | спектроскопии<br>ПК-3<br>ПК-4   |
| 2 | Электронная спектроскопия сложных молекул. | Характеристики электронных спектров- энергия перехода, интенсивность, ширина и форма полосы поглощения. Правила отбора. 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. Типы электронных переходов в спектрах органических молекул. Хромофоры и аукохромы. Обзор спектров различных классов соединений. Объяснение спектров комплексных соединений с позиций теории кристаллического поля /ТКП/. Основные положения ТКП. Действие лигандов на энергетические состояния 3d- орбиталей. Спектрохимический ряд лигандов. Три типа диаграмм Орбела, примеры их использования. Обзор спектров комплексных соединений 3d – металлов. Сравнение теорий кристаллического поля и МО ЛКАО.   | Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4 |
| 3 | Колебательная спектроскопия.               | Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебание гармонического осциллятора с позиции классической механики.: вывод уравнения потенциальной кривой, частоты колебания. Силовая постоянная связи. Результат квантово-механического рассмотрения: уравнение стационарных состояний; колебательное квантовое число; правило отбора ; предполагаемый спектр гармонического осциллятора. Учёт ангармоничности колебаний . Кривая Морзе. Основные колебательные переходы и обер тона, их интенсивности и энергии. Расчёт постоянной ангармоничности. «Горячие» полосы. Колебания многоатомной молекулы. Классификация нормальных колебаний по форме и симметрии. Характеристичность колебаний. Отклонение от характеристичности по частоте - мера изменения свойств данной группы атомов. Причины усложнения экспериментальных ИК- спектров – влияние физического состояния образца, растворителя, полиморфизма. Внутри- и | Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4 |

|   |  |  |   |
|---|--|--|---|
|   |  | <p>межмолекулярных взаимодействий, резонансного взаимодействия колебаний; изотопозамещение. Принципиальная схема ИК – спектрофотометра. Приготовление образцов, Интерпретация спектров. Дальняя и ближняя ИК-области в химических исследованиях. 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. ИК – и КРС – спектроскопия – взаимно дополняющие методы исследования строения молекул.</p> |   |
| 4 | Вращательная спектроскопия.              | <p>Условия применения микроволновой спектроскопии. Модель жёсткого ротатора. Момент инерции. Уравнение энергии вращательного уровня. Вращательное квантовое число. Набор энергетических состояний. Правила отбора. Вращательная постоянная. Вид вращательного спектра двухатомной молекулы. Нежесткий ротатор. Постоянная центробежного растяжения, её связь с силовой постоянной связи. Вращательные спектры многоатомных молекул. Линейные молекулы. Молекулы типа сферического, симметричного, асимметричного волчка. Расчет энергетических состояний симметричного волчка. Понятие эффекта Штарка.</p>             | <p>Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований в микроволновой области спектра<br/>ПК-3<br/>ПК-4</p> |
| 5 | Колебательно-вращательная спектроскопия. | <p>Параллельные и перпендикулярные колебания многоатомных молекул. Колебательно-вращательные уровни, их энергетическая диаграмма. Правила отбора. Структура P, Q, R- ветвей в спектрах молекул различной симметрии.</p>  | <p>Знать квантово-механические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br/>ПК-3<br/>ПК-4</p>                                |
| 6 | Рефрактометрия.                          | <p>Понятие показателя преломления света. Относительный, абсолютный показатель преломления. Зависимость от плотности, поляризуемости молекулы, от температуры, давления, состава растворов, длины волны света. Относительная, средняя, удельная дисперсия. Принципиальная схема рефрактометра типа Аббе. Удельная и молярная</p>  | <p>ПК-3<br/>ПК-4</p>  |

|   |  |  |  |
|---|--|--|--|
|   |  | рефракции. Групповые, связевые, атомные рефракции, структурные инкременты. Вычисление рефракции по аддитивной схеме. Экзальтация молекулярной рефракции. Определение структуры органических соединений по молекулярной рефракции и дисперсии. Вычисление рефракции растворенного вещества.   |  |
| 7 | Спектроскопия в радиочастотной области.                              | Метод электронного парамагнитного резонанса Спиновый и магнитный моменты электрона. Эффект Зеемана для неспаренного электрона. Элементарный магнитный резонанс. Основное уравнение ЭПР, правила отбора и условия получения спектров ЭПР. Параметры спектров ЭПР. 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. Метод ядерного магнитного резонанса. Физические основы метода. Условие ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие ядер. Анализ спектров ЯМР. Протонный магнитный резонанс и его применение в органической химии, достоинства и недостатки метода. ЯМР других магнитных ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР. | Знать квантовомеханические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований ЭПР.<br>ПК-3<br>ПК-4 |
| 8 | Метод ядерного гамма-резонанса.                                      | Эффект Мессбауэра. Допплеровское уширение линий и энергия отдачи. Получение гамма-резонансных спектров. Возможности применения гамма-резонансной спектроскопии в химии.  | Знать квантовомеханические представления о строении вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами спектроскопических исследований.<br>ПК-3<br>ПК-4     |
| 9 | Масс-спектрометрия. Спектроскопия в области рентгеновского излучения | 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. 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.   | Знать теорию строения вещества. Уметь интерпретировать экспериментальные результаты. Владеть методами математической обработки экспериментальных данных.                                 |

|  |  |  |      |
|--|--|--|------|
|  |  |  | ПК-3 |
|  |  |  | ПК-4 |

### Шкала оценивания уровня сформированности компетенций.

| Код и формулировка компетенции   | Этапы формирования компетенции |  | критерии   | показатели   | баллы  |
|--|--------------------------------|--|--|--|--------|
|  |                                |  |  |  |        |
| ОПК-8<br>способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности             | знает (пороговый уровень)      | знает о возможности использования основных естественнонаучных законов для понимания окружающего мира и явлений природы | понимание окружающего мира и явлений природы с точки зрения основных естественнонаучных законов                        | умение объяснять не все различные природные явления на основании знания законов естественнонаучных дисциплин | 61-75  |
|  | умеет (продвинутый)            | умеет использовать основные естественнонаучные законы для понимания окружающего мира и явлений природы                 | понимание окружающего мира и явлений природы с точки зрения основных естественнонаучных законов                        | умение объяснять большинство явлений природы на основании знания законов естественнонаучных дисциплин        | 76-85  |
|  | владеет (высокий)              | использует основные естественнонаучные законы для понимания окружающего мира и явлений природы                         | понимание окружающего мира и явлений природы с точки зрения основных естественнонаучных законов                        | умение объяснять явления природы на основании знания законов естественнонаучных дисциплин                    | 86-100 |
| ОПК-9<br>способностью получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей | знает (пороговый уровень)      | анализировать и излагать получаемую на семинарских занятиях информацию, пользоваться учебной литературой               | особенности и отличия проектной работы, особенности работы в междисциплинарной команде, стили руководства сотрудниками | Умение работать в научной группе   | 61-75  |
|  | умеет (продвинутый)            | работать в команде, в том числе междисциплинарной, работать в проектах   | особенности и отличия проектной работы, особенности работы в междисциплинарной команде, стили руководства              | Умение работать в научной группе   | 76-85  |

|  |                           |  |  |  |        |
|--|---------------------------|--|--|--|--------|
|  |                           |  | сотрудниками   |  |        |
|  | владеет (высокий)         | навыками проектной работы, в частности в междисциплинарных командах, навыками организаторской и руководящей работы | особенности и отличия проектной работы, особенности работы в междисциплинарной команде, стили руководства сотрудниками | Умение работать в научной группе   | 86-100 |
| ПК-2<br>способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта | знает (пороговый уровень) | как организовать экспериментальные исследования и получить результат   | получает результаты, самостоятельно организовав экспериментальные исследования   | количество самостоятельных организованных экспериментальных исследований   | 61-75  |
|  | умеет (продвинутый)       | организовать экспериментальные исследования, получить и обработать результаты                                      | самостоятельно организует исследования, получает результаты и обрабатывает их  | самостоятельно полученные и обработанные результаты исследования, представленные руководителю                                  | 76-85  |
|  | владеет (высокий)         | способность организовать исследование, получить, обработать и проанализировать полученные результаты               | способность проанализировать полученные и обработанные результаты собственных исследований                             | самостоятельно полученные и обработанные результаты исследований, которые можно представить в виде доклада или иной публикации | 86-100 |
| ПК-3<br>способностью эксплуатировать и обслуживать современную физическую аппаратуру оборудование  | знает (пороговый уровень) | как организовать экспериментальные исследования и получить результат   | получает результаты, самостоятельно организовав экспериментальные исследования   | количество самостоятельных организованных экспериментальных исследований   | 61-75  |
|  | умеет (продвинутый)       | организовать экспериментальные исследования, получить и обработать результаты                                      | самостоятельно организует исследования, получает результаты и обрабатывает их  | самостоятельно полученные и обработанные результаты исследования, представленные руководителю                                  | 76-85  |
|  | владеет (высокий)         | способность организовать исследование, получить, обработать и проанализировать полученные результаты               | способность проанализировать полученные и обработанные результаты собственных исследований                             | самостоятельно полученные и обработанные результаты исследований, которые можно представить в виде доклада                     | 86-100 |

|  |  |  |  |                     |  |
|--|--|--|--|---------------------|--|
|  |  |  |  | или иной публикации |  |
|--|--|--|--|---------------------|--|

### **Методические рекомендации, определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины**

Промежуточная аттестация обучающихся по учебной дисциплине осуществляется в рамках завершения изучения данной дисциплины и позволяет определить качество и уровень ее освоения. Предметом оценки освоения являются умения и знания.

Промежуточная аттестация обучающихся осуществляется в форме экзамена и позволяет определить развитие общих компетенций, предусмотренных для ОПОП. Условием допуска к экзамену является успешное освоение обучающимися всех элементов дисциплины (выполнение и сдача всех коллоквиумов и контрольных работ).

Текущий контроль успеваемости осуществляется в ходе повседневной учебной работы по курсу дисциплины. Данный вид контроля стимулирует у обучающихся стремление к систематической самостоятельной работе по изучению учебной дисциплины, овладению общими компетенциями.

В экзаменационном билете содержится:

- 1) тема собеседования (студент отвечает без предварительной подготовки);
- 2) два вопроса из нижеперечисленных;
- 3) задача.

#### **Материал для проведения текущего контроля знаний.**

#### **Контрольные вопросы и задачи для самостоятельной работы, подготовки к контрольным работам и зачету**

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. На каком основании в некоторых учебниках приводятся укороченные энергетические диаграммы МО органических соединений?
5. Приведите примеры соединений, в ЭСП которых проявляются бато- и гипсохромное смещения полос?
6. Как с позиции теории МО ЛКАО объяснить концепцию хромофорного и ауксохромного влияния на поглощения излучения?
7. Объясните различия энергетических диаграмм МО октаэдрических комплексов, рассчитанных: а) с учётом лишь сигма-связей металл-лиганд; б) с учётом и сигма- и пи-связей металл-лиганд.

8. какие результаты квантово-механического расчёта используются для предсказания спектров сложных молекул?
9. Какие факторы влияют на значение молярного коэффициента экстинкции?
10. Орбитали каких атомов в комплексных соединениях рассматриваются в ТКП? Нарисуйте эти орбитали.
11. Объясните тот факт, что спектр многоатомной молекулы имеет несколько полос, а не одну.
12. 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.

### Колебательная спектроскопия

1. каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции классической механики?
2. Какие характеристики двухатомной молекулы влияют на чистоту ее колебания? Напишите уравнение этой зависимости.
3. Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
4. Каков результат рассмотрения модели ангармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
5. Предскажите и сравните ИК-спектры гармонического и ангармонического осцилляторов.
6. Справедливо ли утверждение «чем больше частота колебательного перехода, тем больше его интенсивность»?
7. В чем заключается различие понятий «нормальная координата» и «естественная координата»?
8. Чем вызвана необходимость введения понятия нормальной координаты многоатомной молекулы?
9. Объясните, почему для молекул  $\text{Br}_2$ ,  $\text{O}_2$  и других гомоядерных двухатомных молекул не удаётся зарегистрировать ИК- спектр?
10. Какие классификации нормальных колебаний Вам известны? Приведите примеры.
11. Приведите примеры и сравните частоты колебаний разной формы у одной и той же группы атомов.
12. Какие факторы влияют на частоту и интенсивность полосы поглощения определённой группы атомов?

### Колебательно-вращательная спектроскопия.

1. Какие из представленных молекул –  $\text{HC1}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{C1}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{C1}$ ,  $\text{CC1}_4$ ,  $\text{CHC1}_3$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{C1}$  можно исследовать методами вращательной и колебательно-вращательной спектроскопии?
2. Вычислите и нарисуйте энергетическую диаграмму вращательных уровней, в которой вращательное квантовое число равно 0, 1, 2, 3, 4.
3. Объясните факт наличия большого числа линий и прохождение интенсивности их через максимум во вращательном спектре.
4. Докажите, что симметричного волчка один момент инерции отличается от двух других одинаковых моментов инерции.
5. Имеются ли различия в колебательно-вращательных спектрах молекул  $\text{CO}_2$  и  $\text{HCN}$ ? Ответ обоснуйте.
6. У молекул  $\text{N}_2\text{O}$  и  $\text{NO}_2$  имеется по 3 основных колебания, некоторые из них видны одновременно в ИК и КР – спектрах. Полосы  $\text{N}_2\text{O}$  имеют простой PR – контур, полосы  $\text{NO}_2$  – сложную вращательную структуру. Каково строение молекул?

#### Задачи

1. Вычислите число оборотов в секунду, которое совершает молекула  $\text{BrF}$  с моментом инерции  $7,837 \cdot 10^{-46}$  кг м<sup>2</sup>, когда она находится в состоянии с разными  $J$ : 0; 1; 10. Ответы: 0;  $3,02 \cdot 10^{10}$ ;  $2,24 \cdot 10^{11}$  с<sup>-1</sup>.
2. Вращательная постоянная  $\text{H}_3\text{C}_1$  равна  $10,5909$  см<sup>-1</sup>. Чему она равна для  $\text{H}_3\text{C}_1$  и  $\text{D}_3\text{C}_1$ ? Ответы:  $10,5739$  и  $5,4460$  см<sup>-1</sup>
3. Для молекулы  $\text{HC}_1$  вращательная постоянная равна  $10,593$  см<sup>-1</sup>, постоянная центробежного растяжения –  $5,3 \cdot 10^{-4}$  см<sup>-1</sup>. Вычислите частоту колебания и силовую постоянную связи. Ответы:  $\nu_0 = 2995$  см<sup>-1</sup>;  $k = 516$  н/м.

#### Рефрактометрия

1. Какие из приведённых ниже выражений относятся к абсолютному показателю преломления, какие – к относительному? а) отношение синуса угла падения луча в первой среде к синусу угла падения во второй среде; б) отношение угла падения луча во второй среде к углу падения в первой среде; в) отношение абсолютного показателя преломления 2-го вещества к абсолютному показателю преломления 1-го вещества; г) отношение скорости света в пустоте к скорости света в веществе; д) отношение скорости света в первой среде к скорости света во второй среде; е) произведение показателя преломления воздуха и показателя преломления вещества, измеренного по отношению к воздуху. ж) произведение  $1,00027$  и измеренного показателя преломления исследуемого вещества.

2. Зависимость показателя преломления от длины волны называют: а) рефракцией; б) дисперсией в) экзальтацией г) поляризацией д) аномалией е) поляризуемостью.
3. 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.
4. В каких случаях зависимость показателя преломления от состава раствора прямолинейна? а) для идеальных растворов, если измерялся  $n_D$  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.
5. Одинаково ли значение молекулярной рефракции одного и того же вещества, вычисленное и по  $n_D$  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.
6. 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.

#### ЭПР – спектроскопия

1. Сколько пиков со сверхтонкой структурой можно ожидать вследствие делокализации неспаренного электрона в катионе дибензолхрома между кольцами?
2. Предскажите спектр ион-радикала хлорбензола при условии, что разрешены все сверхтонкие линии.
3. Для какого бимолекулярного процесса – с константой скорости  $10^7$  или  $10^{10}$  – уширение линии при прочих равных условиях будет больше?

#### ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Правила отбора в ИК-спектроскопии. Обертонны.
2. Эффект Штарка.
3. Гармонические и ангармонические колебания. Силовая постоянная.
4. Комбинационное рассеяние света.
5. Спектры комбинационного рассеяния.

6. Групповые колебания.
7. Вращательная спектроскопия. Модель жесткого ротатора.
8. Гармонический осциллятор. Ангармоничность.
9. Условия появления вращательных спектров.
10. Применение ИК-спектроскопии. Метод базовой линии.
11. Анализ колебательно-вращательных спектров.
12. ИК-спектроскопия – основные положения и правила отбора.
13. Поляризованные и деполаризованные линии в спектрах КР.
14. Обертоны в ИК-спектрах.
15. Сопоставьте возможности методов спектроскопии (электронной, колебательной, вращательной, колебательно-вращательной) в исследованиях строения молекул.
16. Блок-схема спектрометра ЯМР и принцип его действия.
17. Колебания ангармонического осциллятора.
18. Изотропное и анизотропное сверхтонкое взаимодействие.
19. Вращательный спектр жесткого ротатора.
20. Химический сдвиг в спектрах ЯМР.
21. Предсказание с позиций ТКП различия электронных спектров поглощения тетраэдрического и квадратного комплексного ионов одного и того же металла.
22. Характеристики электронных спектров многоатомных молекул.
23. Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ЯМР.
24. Правила отбора в электронной спектроскопии поглощения.
25. Колебания многоатомных молекул.
26. Электронные спектры поглощения органических соединений.
27. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
28. Электронные спектры поглощения комплексных соединений 3d-металлов с позиций метода МО ЛКАО.
29. Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул.
30. Причины, вызывающие усложнение интерпретации ИК-спектров сложных молекул.
31. Эффект Зеемана для молекулы O<sub>2</sub>.
32. Расчет энергетических вращательных уровней жесткого ротатора.
33. Правила отбора в электронной спектроскопии поглощения.
34. Можно ли зарегистрировать электронные, колебательные, вращательные, колебательно-вращательные спектры поглощения молекул O<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CHN, C<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>. Объясните особенности спектров.
35. Эффект Зеемана для магнитных ядер.
36. Типы электронных переходов многоатомной молекулы органического соединения, их характеристики, проявления в спектрах.
37. Спектроскопия комбинационного рассеяния света

- 38.Объясните с позиций ТКП электронные спектры поглощения комплексных соединений.
- 39.Колебания гармонического осциллятора.
- 40.Сверхтонкое взаимодействие в спектрах ЯМР.
- 41.Парамагнитный и диамагнитный эффекты.
- 42.Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул.
- 43.Классификация нормальных колебаний многоатомной молекулы по форме и симметрии.
- 44.Расчет силы осциллятора электронного перехода.
- 45.Сопоставить правила отбора, возможности методов ИК- и КРС-спектроскопии. 46.Вращательный спектр молекулы типа симметричного волчка.
- 47.Каким образом, имея ИК-спектр поглощения, вычислить частоту колебаний гармонического осциллятора и коэффициент ангармоничности?
- 48.Характеристики всех типов электронных переходов в спектрах органических молекул. Факторы, влияющие на эти характеристики