

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе, качеству образования – первый проректор



_____ Хагуров Т.А.

подпись

_____ 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.01 «ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ»**

Направление подготовки - 04.03.01 Химия

Направленность - аналитическая химия

Программа подготовки – прикладная


Форма обучения - очная

Квалификация выпускника - бакалавр


Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины «Физические методы исследования» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 12.03.2015 № 210 по направлению подготовки 04.03.01 – Химия (уровень бакалавриата)

Программу составил

д.х.н., профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии Буков Н.Н. 

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры аналитической химии « 19 » 09 2018 г., протокол № 5


Заведующий кафедрой д.х.н., профессор Темердашев З.А. 

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры ОНХиИВТвХ

« 10 » апреля 2018 г., протокол № 8

Заведующий кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий « 20 » апреля 2018 г., протокол № 5

Председатель УМК факультета доцент Стороженко Т.П. 

Эксперты:

Петров Н.Н. Генеральный директор ООО «Интеллектуальные композиционные решения», кандидат химических наук, доцент

Исаев В.А. Зав. кафедрой теоретической физики и компьютерных технологий КубГУ, д-р физ.-мат. наук, доцент

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

Преподавание курса «Физические методы исследования» имеет целью закрепить у студентов понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений, важнейших для химиков физических методов исследования химических соединений, знакомство с их аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, в том числе публикуемые в научной литературе.

1.2 Задачи дисциплины

- Изучение физической теории методов, схем и методик проведения эксперимента;
- Формирование представлений о возможностях использования тех или иных физических методов для решения обратных задач, т.е. определения искомых параметров объектов исследования;
- Анализ возможностей физических методов с точки зрения их теоретического и практического применения, в том числе в промышленности.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1 учебного плана. Данный курс опирается на знания по физике, математике (природа электромагнитного излучения, типы взаимодействия его с матрицей, техника спектрального эксперимента, приемы математического анализа). Для успешного применения ряда физических методов необходимо знание основ квантовой механики (основные определения и фундаментальные понятия, квантово-механическая теория строения молекул). Изложение материала о строении молекул предполагает наличие базовых знаний о современных вычислительных возможностях квантовой химии. Интенсивное внедрение в эксперимент вычислительной техники требует наличия у студентов навыков работы как со стандартными программными системами, широко используемыми в настоящее время для обработки экспериментальных данных, так и владения современным языком математической формализации тех физических задач, которые возникают при анализе спектральных данных.

Полученные студентами знания необходимы при изучении специальных курсов. Знания, приобретенные при освоении курса, могут быть использованы при решении различных задач специальных химических дисциплин.

Знания, приобретенные при освоении данного курса, будут использованы при решении структурных задач выпускных квалификационных работ по неорганической химии и химии координационных соединений.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Физические методы исследования», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций: ОПК-1, ПК-2 и ПК-5

№ п.п	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-1	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	теоретические основы фундаментальных разделов химии	использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	методологией решения профессиональных задач
2	ПК-2	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	базовые приемы использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	применять данные физических методов исследования при проведении научных исследований	базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований
3	ПК-5	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования	применять современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования	методологией обработки результатов научных экспериментов физическими методами исследования

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач.ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		7			
Контактная работа, в том числе:	94,5	94,5			
Аудиторные занятия (всего)	90	90			
Занятия лекционного типа	36	36			
Лабораторные занятия	-	-			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	54	54			
Иная контактная работа	4,5	4,5			
Контроль самостоятельной работы (КСР)	4	4			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,5	0,5			
Самостоятельная работа, в том числе:	58,8	58,8			
Проработка учебного (теоретического) материала	36	36			
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций, докладов)	-	-			
Подготовка отчетов по лабораторным работам и их защите	-	-			
Подготовка к текущему контролю	22,8	22,8			
Контроль:	26,7	26,7			
Подготовка к экзамену	-	-			
Общая трудоемкость	час	180	180		
	контактная работа	94,5	94,5		
	зач. ед	5	5		

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 7 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа СРС
			Л	ЛР	ПР	
1.	Общая характеристика физических методов исследования.	6	2	-	2	2
2.	Введение в спектроскопию	10	2	-	-	8
3.	Электронная спектроскопия	22,8	6	-	10	6,8
4.	Колебательная спектроскопия.	22	6	-	8	8
5.	Электронный парамагнитный резонанс	16	4	-	4	8
6.	Ядерный магнитный резонанс	20	4	-	8	8
7.	Масс-спектрометрия	16	4	-	4	8
8.	Другие физические методы исследования	11	4	-	-	7
9.	Совместное применение спектральных методов исследования	21	4	-	14	3
	<i>Всего:</i>		36	-	54	58,8

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ ра з де ла	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Общая характеристика физических методов исследования.	Физическая теория методов. Прямая и обратная задачи. Понятия корректной и некорректной постановки задач физических методов. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Возможности, области применения и интеграция физических методов исследования.	УО
2	Введение в спектроскопию	Электронные состояния молекул, определение и основные характеристики. Волновая функция, энергия, вырожденность, мультиплетность, время жизни и заселённость электронных состояний. Колебательно-вращательная структура электронных состояний и электронно-колебательно-вращательные переходы в молекулах. Тонкая и сверхтонкая структура электронных спектров молекул. Принцип Франка-Кондона. Классификация и номенклатура электронных состояний и переходов между ними в двухатомных, многоатомных линейных и нелинейных молекулах. Классификация по Каша и Малликену, концепция хромофорных и ауксохромных групп, переходы с переносом заряда.	К
3	Электронная спектроскопия	Критерии отнесения полос поглощения к различным электронным переходам. Влияние эффектов сопряжения, пространственных эффектов и полярности растворителя на электронные спектры поглощения молекул. Эмпирические правила Вудворда-Физера. Квантовомеханическая вероятность электронно-колебательно-вращательных переходов и сила осциллятора.	К

		<p>Интенсивность полос поглощения различных электронных переходов. Правила отбора и нарушение запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, количественном и структурном видах анализа. Определение молекулярных постоянных двухатомных молекул. Специфика электронных спектров поглощения различных классов химических соединений. Техника и методы абсорбционной спектроскопии в видимой и ультрафиолетовой областях.</p>	
4	Колебательная спектроскопия.	<p>Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация. Фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Инфракрасные (ИК) спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР). Правила отбора и интенсивность полос колебательных переходов в ИК-спектрах поглощения и в спектрах КР. Классический подход к решению прямой и обратной колебательных задач. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные и нормальные координаты молекул. Коэффициенты кинематического взаимодействия и силовые постоянные. Учёт симметрии молекул. Типы симметрии нормальных колебаний. Приводимые и неприводимые представления. Таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп симметрии и правила пользования ими при определении типов симметрии и активности нормальных колебаний молекул в спектрах ИК и КР. Характеристичность нормальных колебаний. Концепция групповых частот и её ограничения. Сопоставление ИК- и КР-спектров и выводы о симметрии молекул.</p> <p>Идентификация спектральных данных. Качественный и количественный анализ. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций. Методы и техника ИК- и КР-спектроскопии. Понятия о методах НПВО и МНПВО. Подготовка образцов для регистрации спектров.</p>	К
5	Электронный	Метод электронного парамагнитного резонанса	К

	парамагнитный резонанс	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.	
6	Ядерный магнитный резонанс	Ядерный спиновый и магнитный моменты. Магнитно активные ядра атомов химических элементов и их изотопов. Физические основы явления ЯМР. Снятие вырождения спиновых состояний ядер в постоянном магнитном поле, эффект Зеемана. Условия возникновения ЯМР. Заселённость энергетических уровней. Насыщение, релаксационные процессы, ширина сигнала в спектроскопии ЯМР. Влияние электронного окружения на результирующее магнитное поле, константы электронного экранирования ядер. Протонный магнитный резонанс, ЯМР ^{13}C и других ядер. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Шкалы химических сдвигов. Спин-спиновое взаимодействие ядер и его природа. Энергетические состояния систем взаимодействующих спинов и мультипликативные функции для описания этих систем. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности между сигналами спектра ЯМР и между компонентами в мультиплетом сигнале, фундаментальное правило ЯМР-спектроскопии. Константы спин-спинового взаимодействия, их физический смысл, классификация и информативность. Техника и методы эксперимента. Применение метода ЯМР в химии. Структурный анализ. Изучение быстротекающих процессов. Химическая поляризация ядер.	К
7	Масс-спектрометрия	Методы ионизации молекул. Электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация, комбинированные методы. Ионный ток и потенциал появления ионов. Принцип Франка-Кондона. Диссоциативная ионизация. Типы	К

		ионов в масс-спектрометрии. Принципы устройства масс-спектрометров. Применение масс-спектрометрии. Идентификация веществ. Таблицы массовых чисел. Соотношение изотопов. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Термодинамические исследования. Определение парциальных давлений компонентов газовой смеси. Определение теплоты сублимации, теплоты реакции и констант равновесия.	
8	Другие физические методы исследования	Понятие о спектрах флуоресценции и фосфоресценции. Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и оже-спектроскопии. Методы изучения поляризуемости молекул: дисперсия оптического вращения и оптический круговой дихроизм. Методы определения электрических дипольных моментов молекул. Методы определения геометрии молекул. Ядерный квадрупольный резонанс. Ядерный гамма-резонанс.	
9	Совместное применение спектральных методов исследования	Стратегия выбора конкретных видов физических методов исследования. Сопоставление экспериментальных результатов.	

2.3.2 Занятия семинарского типа

№	Тема	Час.
1.	Общие подходы и вопросы спектроскопии	2
2.	Классификация и отнесение электронных переходов и соответствующих полос в УФ и видимых спектрах	6
3.	Применение абсорбционной УФ спектроскопии в структурном анализе.	4
4.	Классическое рассмотрение колебаний простых многоатомных молекул.	4
5.	Использование групповых частот в структурном анализе.	4
6.	Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций методом ЭПР.	4

7.	Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР.	8
8.	Идентификация веществ по данным масс-спектрологии.	4
9.	Комплексное применение методов спектроскопии в качественном и количественном анализе, исследовании равновесий и кинетики реакций.	8
10.	Стратегия выбора физических методов исследования при решении экспериментальных задач.	6

ИТОГО: 54 ч.

2.3.3 Лабораторные занятия

Лабораторные работы по дисциплине не предусмотрены

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Проведение курсовых работ по дисциплине – не предусмотрено

2.3.5 Примерная тематика КРС

1. Общая характеристика методов молекулярной спектроскопии.
2. Классификация спектральных методов исследования.
3. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом.
4. Основные применения спектральных методов.
5. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов в спектроскопии.
6. Правила отбора спектральных полос поглощения.
7. Энергетические состояния атомов и молекул. Термы.
8. Полуэмпирические методы в спектроскопии.
9. Основные спектральные методы расчета констант реакций.
10. Прямая и обратная спектральная задача.
11. Виды спектральных измерений по условиям, определяющим точность результата.
12. Химические процессы, влияющие на ширину спектральной линии.
13. Энергетические уровни двухатомной молекулы.
14. Виды спектроскопии по свойствам излучения.
15. Естественные пределы спектральных измерений.
16. Спектральные особенности ионов переходных металлов.
17. Техника эксперимента в электронной спектроскопии.
18. Колебательная (ИК-, КР-) спектроскопия.
19. Концепция групповых частот в колебательной спектроскопии
20. Симметрия молекулярных колебаний
21. Методика эксперимента в колебательной спектроскопии.
22. Различия в ИК- и КР-спектроскопии.
23. Нормальные колебания многоатомных молекул.
24. Магнитные свойства ядер. Переходы в ЯМР.

25. Моделирование спектров ЯМР ^1H по уравнениям Шулери
26. ЭПР-спектроскопия. g-фактор.
27. Техника эксперимента в радиоспектроскопии.
28. Масс-спектроскопия.
29. Процессы фрагментации в масс-спектроскопии.
30. Интерпретация масс-спектров.
31. Хромато-масс-спектрометрия.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1.	Введение	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf
2.	Электронная спектроскопия.	Буков Н.Н., Павлов П.А., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 1. Электронные спектры. Уч. пособие, КубГУ. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf
3.	Колебательная спектроскопия.	Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNAYSPEKTROSKOPIY_4.pdf Буков Н.Н., Костырина Т.В., Абрамов Д.Е., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 2. Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIESPEKTRI_3.pdf
4.	Радиоспектроскопия.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3: Спектроскопия ЯМР (H^1). – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROS

		КОПИЙМР_5.pdf
5.	Масс-спектрометрия.	Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений: учебное пособие М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 548 с.
6.	Совместное применение спектральных методов.	Буков Н.Н., Буикликий В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001

3. Образовательные технологии

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
4	Л	электронные презентации	20
	ПР	-	
	ЛР	решение проблемных ситуаций в составе малых групп.	10
Итого:			30

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной форме в процессе проведения семинарских занятий. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и опроса.

Итоговый контроль осуществляется приемом зачета и экзамена в 7 семестре.

Студенты обязаны сдать зачет и экзамен в соответствии с расписанием и учебным планом.

Зачет и экзамен по дисциплине преследуют цель оценить работу студента за курс, получение теоретических знаний, их прочность, развитие творческого мышления, приобретение навыков самостоятельной работы, умение применять полученные знания для решения практических задач.

Экзаменатору предоставляется право задавать студентам дополнительные вопросы по всей учебной программе дисциплины.

Форма проведения экзамена: устно, с письменным решением задачи и основными тезисами по теоретическим и дополнительным вопросам.

Студенты имеют право на досрочную аттестацию в случаях: а) самостоятельного решения всех задач по курсу; б) инициативному написанию рефератов по темам лекционного курса.

Результат сдачи зачета и экзамена заносится преподавателем в экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Требования к знаниям: - бакалавр должен обладать базовыми и углубленными знаниями физических методов исследования; знать базовые приемы использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, принципы построения и функционирования измерительных устройств и систем в химии, а также современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования.

Требования к характеристикам умений и владений – бакалавр должен уметь применять данные физических методов исследования при проведении научных исследований, а также владеть методологией обработки результатов научных экспериментов физическими методами исследования.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала

- обучаемый имеет определенное представление о физических методах исследования, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**неудовл., незачтено**);

- обучаемый имеет четкие представления о физических методах исследования, понимает их сущность, однако обнаруживает затруднение в их воспроизведении и применении на практике, что приводит к необходимости уточняющих и дополнительных вопросов в процессе проверки (**удовл**);

- обучаемый достаточно полно осмыслил материал о физических методах исследования, с пониманием формулирует соответствующие понятия (теоретические положения), хотя при их обосновании и воспроизведении нуждается в некоторых уточнениях, обнаруживает умение применять усвоенные знания на практике, допуская мелкие, несущественные недочеты в письменных работах (**хор**);

- высший уровень владения материалом состоит в глубоком осмыслении физических методов исследования на понятийном уровне, в умении свободно и логично воспроизводить и обосновывать содержащиеся в них положения примерами и фактами, а также не допускать ошибок при выполнении письменных и практических работ, проявлять самостоятельность и элементы творчества (**отл**).

Студенты, успешно решившие задачи контрольных работ, аттестуются досрочно.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

ВАРИАНТЫ КОНТРОЛЬНЫХ ЗАДАЧ по курсу «Физические методы исследования»

4.1.1 Электронная спектроскопия

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. К какому типу переходов относятся полосы поглощения ацетофенона с максимумами при 240, 280 и 320 нм (в гексане), если известно, что $D_{240} = 0,63$ ($l = 0,5$ см; $C = 1 \cdot 10^{-3}$ моль/л); $D_{280} = 0,85$ ($l = 1$ см; $C = 1 \cdot 10^{-3}$ моль/л); $D_{320} = 0,42$ ($l = 1$ см; $C = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/л).

2. К какому типу переходов относятся полосы поглощения форона ((CH_3)₂C = СНСО – СН = C(CH_3)₂) при $\lambda_{\text{max}} = 380$ и 260 нм, если известно, что $D_{380} = 0,80$ ($l = 1$ см; $C = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/л); $D_{260} = 0,24$ ($l = 0,01$ см; $C = 1 \cdot 10^{-3}$ моль/л).

3. Объясните разницу в спектрах поглощения β -нафтола и 2-нафтилкарбинола (рис. 8).

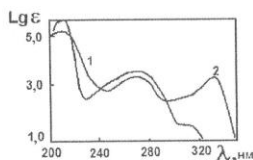
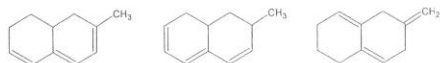


Рис. 8. Электронные спектры к задаче 3

4. Какой из структур принадлежит электронный спектр с полосой поглощения $\lambda_{\text{max}}^{\text{гексан}} = 249$ нм?



5. Определите, какому из растворителей: гексану, спирту или воде – соответствует каждая кривая поглощения окиси мезитила, представленная на рис. 9. Объясните происходящие в спектре изменения.

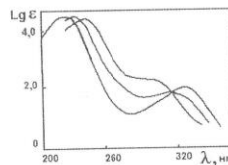


Рис. 9. Электронный спектр к задаче 5

6. На рис. 10 приведены спектры α -нафтиламина в спиртовом растворе и в кислом водно-спиртовом растворе. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

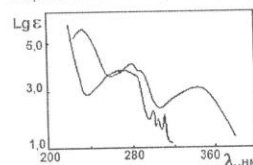


Рис. 10. Электронные спектры к задаче 6

7. *o*-Аминофенол в спиртовых растворах имеет спектр, приведенный на рис. 11. На том же рисунке даны спектры *o*-аминофенола в кислом и щелочном растворах. Определите, какому растворителю соответствует каждая кривая поглощения.

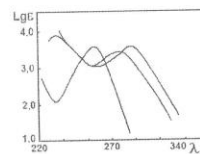


Рис. 11. Электронные спектры к задаче 7

8. К какому классу принадлежит углеводород с молекулярной массой около 120, УФ-спектр которого представлен на рис. 12.

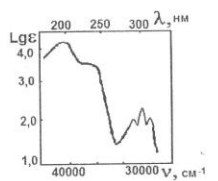


Рис. 12. Электронный спектр к задаче 8

9. Установите строение кетона с молекулярной массой около 120, УФ-спектр которого в этаноле представлен на рис. 13.

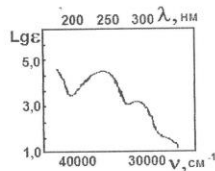


Рис. 13. Электронный спектр к задаче 9

10. Какие выводы можно сделать о структуре карбоновой кислоты с молекулярной массой 138 по ее УФ-спектру (в этаноле) (рис. 14).

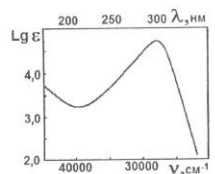


Рис. 14. Электронный спектр к задаче 10

34

11. К какому классу органических соединений относится вещество $C_{10}H_{14}O$, УФ-спектры которого (рис. 15) сняты в этанольном растворе (1) и в растворе спиртовой щелочи (2)?

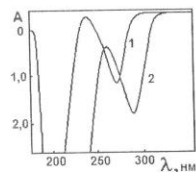


Рис. 15. Электронные спектры к задаче 11

12. На рис. 16 представлены электронные спектры соединения $C_6H_5NO_2$, записанные для водного (1) и водно-щелочного (2) растворов. Каково строение соединения и в чем причина сильного эффекта растворителя?

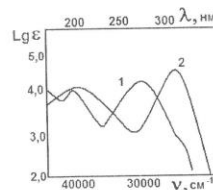


Рис. 16. Электронные спектры к задаче 12

13. При гидролизе 5-метил-3-хлор-1,4-гексадиена были выделены два изомерных карбинола. Спектр одного из них содержит полосу при 223 нм ($\lg \epsilon = 4,4$), а другого – при 236 нм ($\lg \epsilon = 4,3$). Каково их строение?

35

14. Какова конфигурация 2,3-диметил-2,4-гексадиена, имеющего в УФ-спектре единственную полосу поглощения при 220 нм ($\epsilon = 3850$)?

15. На рис. 17 представлены спектры п- и м-оксибензойных кислот в кислом и щелочном метаноле. Какому изомеру отвечает каждая пара кривых? Объясните влияние pH на спектры изомеров.

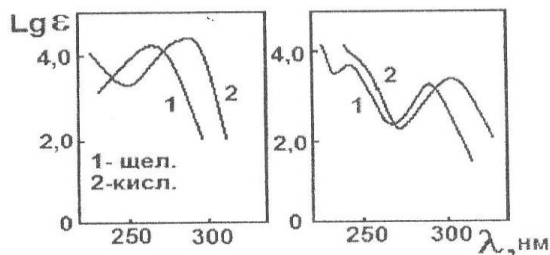
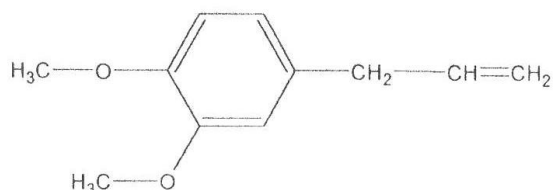


Рис. 17. Электронные спектры к задаче 15

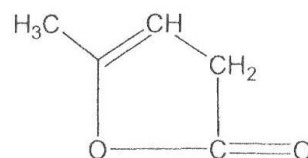
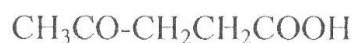
4.1.2 Колебательная спектроскопия

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Один из изомерных нафтолов имеет спектр, приведенный на рис. 12а. На рис. 12б и 12в даны спектры α - и β -нафтолов. Определите, какому из изомеров идентично соединение?
2. Сопоставьте спектры поглощения со структурой соединения (рис. 13).



3. Соединение с брутто-формулой $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рис. 14. (КВr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.
4. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_8O_2$ (Рис. 15)?
5. Выскажите предположение о структуре соединения по приведенному ИК-спектру и брутто-формуле $C_5H_8O_2$ (Рис. 16).
6. В какой форме – открытой или лактонной – существует левулиновая кислота, если в ИК-спектре найдены полосы $3260, 2970, 2930, 2870, 2850, 1720, 1705, 900 \text{ см}^{-1}$?



7. В ИК-спектре раствора вещества найдены полосы $3450, 3370, 1630 \text{ см}^{-1}$. Какому соединению соответствует спектр: $CH_3CON(CH_3)_2$, $CH_3CONHCH_3$ или CH_3CONH_2 ?
8. Произведите отнесение полос поглощения в ИК-спектре пентен-1-она-3. (Рис. 17).
9. Сопоставьте данные ИК-спектра со структурой 2-фенилбутин-3-ола-2. (Рис. 18).
10. Соотнесите данные ИК-спектров со структурами веществ. (Рис. 19).
11. Определите строение соединения C_3H_6O по данным ИК-спектра. (Рис. 20).

12. Приведены ИК-спектры анилина, дифениламина и дипропиламина. Какому соединению принадлежит каждый из этих спектров? Ответ поясните. (Рис. 21).

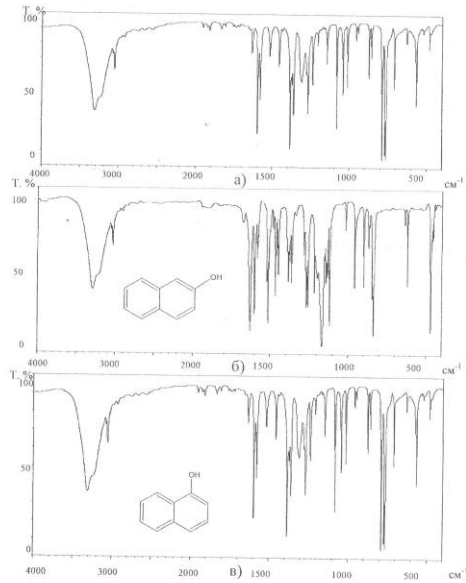


Рис. 12. К задаче 1.

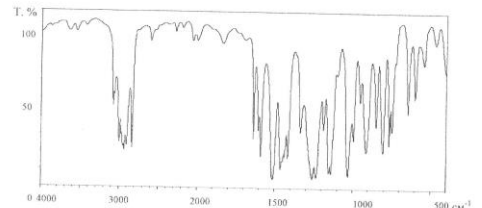


Рис. 13. К задаче 2.

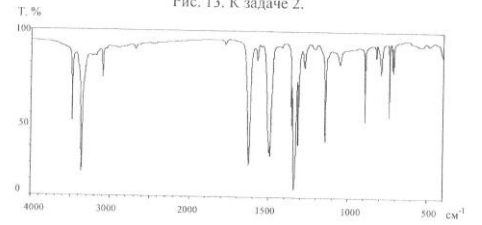


Рис. 14. К задаче 3.

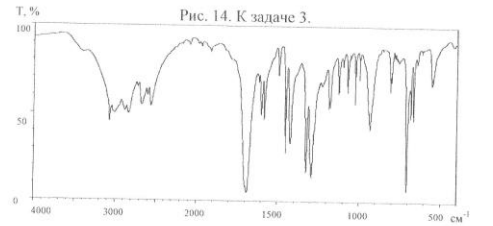


Рис. 15. К задаче 4.

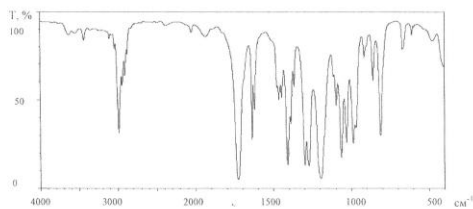


Рис. 16. К задаче 5.

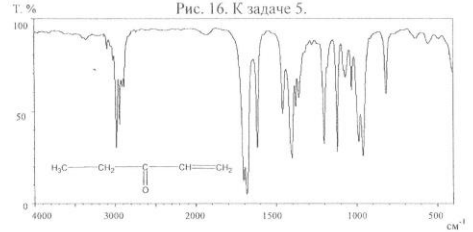


Рис. 17. К задаче 8.

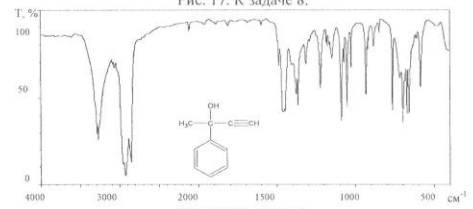


Рис. 18. К задаче 9.

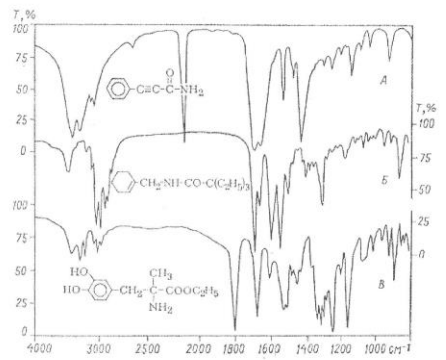


Рис. 19. К задаче 10.

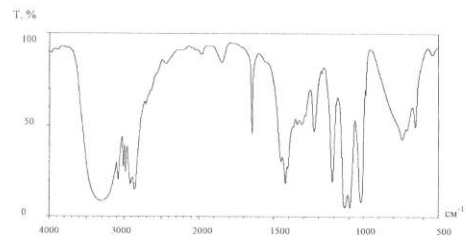


Рис. 20. К задаче 11.

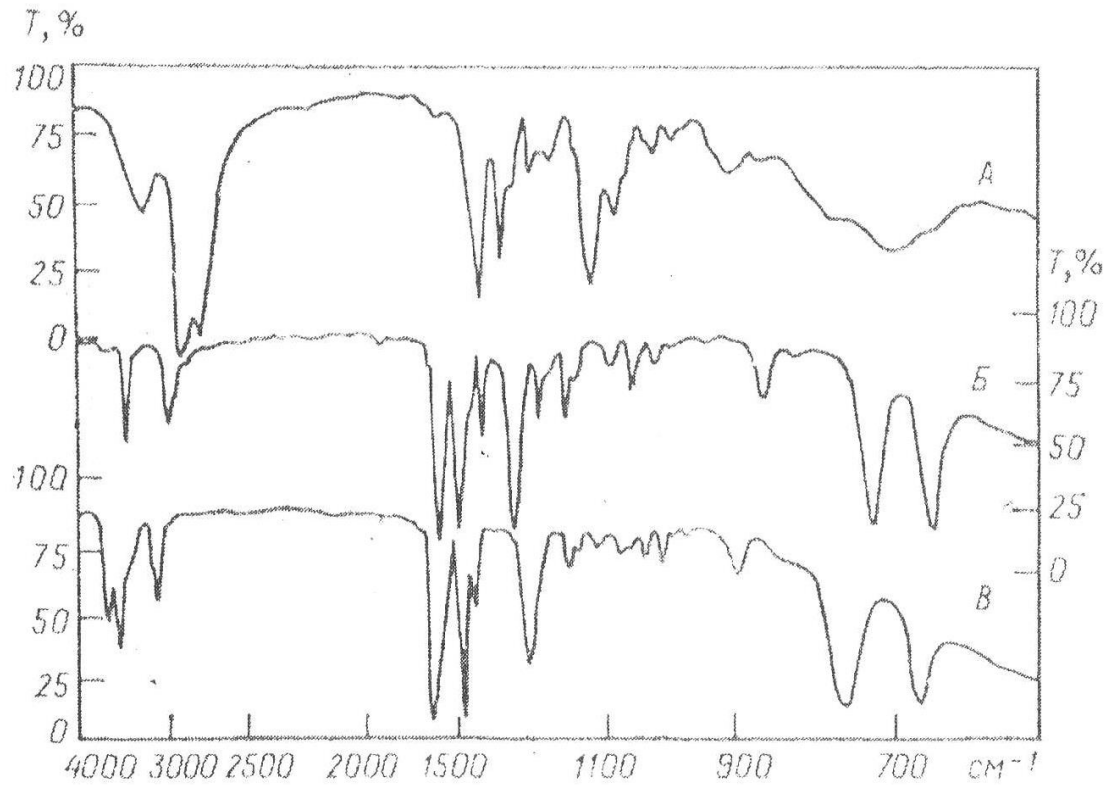


Рис. 21. К задаче 12.

4.1.3. Спектроскопия ЯМР(H^1)

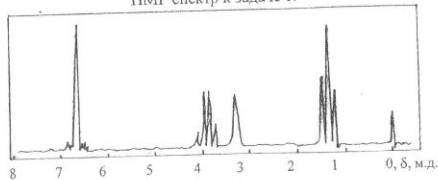
$\delta_{\text{сн}_2} = 1,20 + 1,45 + 0,53 = 3,18$ м.д. (II)
Условно задачи соответствуют химические сдвиги, вычисленные для структуры (II), но не (I). Таким образом, исследуемое вещество является 2-хлор-2-метил-1-фенилпропаном.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Задача 1. Соединение $C_8H_{11}NO$ имеет в ИК-спектре полосы поглощения 3490 и 3400 cm^{-1} . По приведенному ниже ПМР-спектру установите структуру соединения.

Рисунок 11.

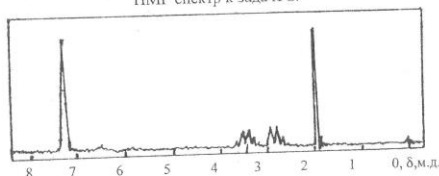
ПМР спектр к задаче 1.



Задача 2. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения $C_6H_5CH_2CH_2NHCOCH_3$. Отнесение сигналов подтвердите расчетом:

Рисунок 12.

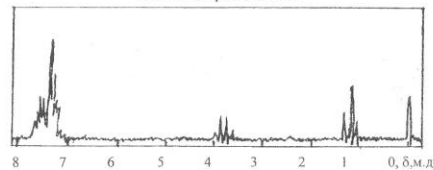
ПМР спектр к задаче 2.



Задача 3. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения $(C_6H_5)_3SiOC_2H_5$. Отнесение сигналов подтвердите расчетом по аддитивной схеме:

Рисунок 13.

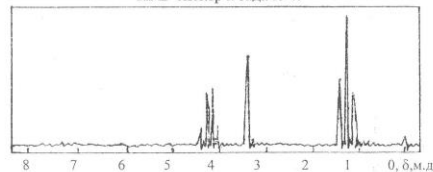
ПМР спектр к задаче 3.



Задача 4. Установить строение соединения $C_7H_{12}O_4$ по ПМР-спектру. Отнесение сигналов подтвердите расчетом по аддитивной схеме:

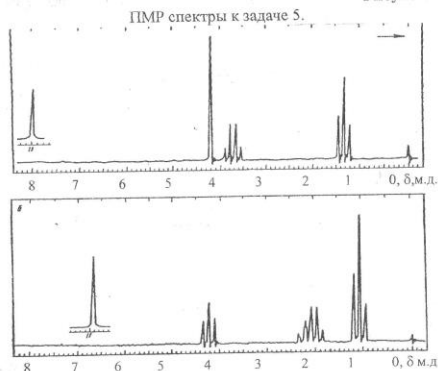
Рисунок 14.

ПМР спектр к задаче 4.



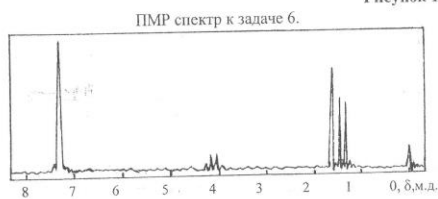
Задача 5. Установите строение соединений $C_4H_8O_3$ (а) и $C_4H_7O_2Br$ (б) по приведенным спектрам ПМР. Отнесение сигналов подтвердите расчетом по аддитивной схеме. Оцените константы спин-спинового взаимодействия:

Рисунок 15.



Задача 6. Определите структуру соединения $C_8H_{11}N$ по спектру ПМР:

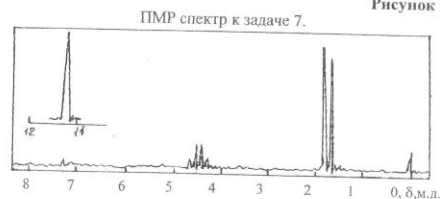
Рисунок 16.



34

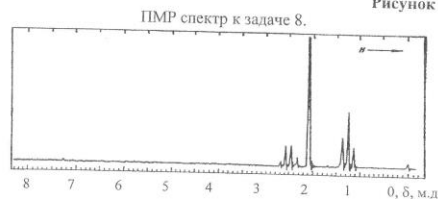
Задача 7. По спектру ПМР соединения $C_3H_5ClO_2$ определите его строение (Рис. 17). Отнесение сигналов подтвердите расчетом по аддитивной схеме. Сравните спектр и полученный результат с задачей № 5.

Рисунок 17.



Задача 8. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения пара- $F-C_6H_4-CH(OH)CH_3$. Отнесение сигналов подтвердите расчетом по аддитивной схеме:

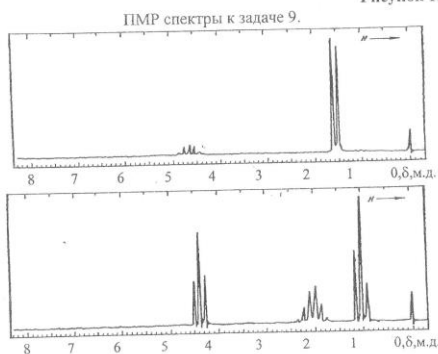
Рисунок 18.



Задача 9. Определите структуру двух изомерных нитросоединений с общей брутто-формулой $C_3H_7NO_2$ по их ПМР-спектрам (Рис. 19). Положение сигналов протонов подтвердите расчетом по аддитивной схеме. Оцените константы спин-спинового взаимодействия:

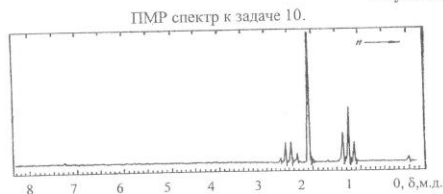
35

Рисунок 19.



Задача 10. Определите по спектру структурную формулу сернистого соединения, содержащего в молекуле один атом серы и три атома углерода

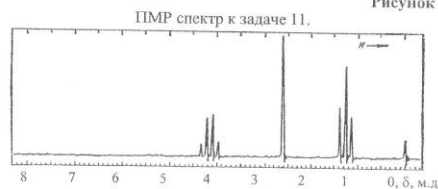
Рисунок 20.



Задача 11. Какова структура соединения $C_3H_7O_4$, спектр ПМР которого содержит три сигнала с соотношением площадей 2:2:3?

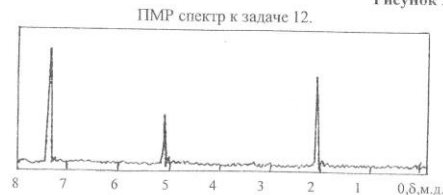
36

Рисунок 21.



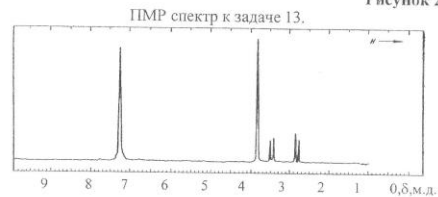
Задача 12. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения $C_6H_5CH_2OOCCH_3$:

Рисунок 22.



Задача 13. Определите строение сложного эфира $C_{11}H_{10}O_2Cl_2$:

Рисунок 23.

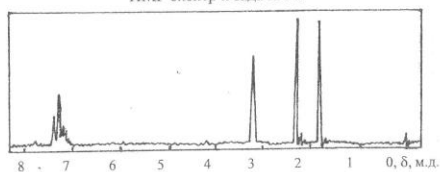


37

Задача 14. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения орто- $\text{CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{-N(CH}_3\text{)COCH}_3$:

Рисунок 24.

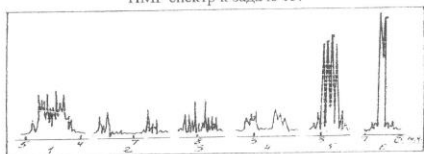
ПМР спектр к задаче 14.



Задача 15. Идентифицируйте системы: пара-дизамещенного бензола, алифатические $\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ группы, симметрично орто-замещенный бензол.

Рисунок 25.

ПМР спектр к задаче 15.

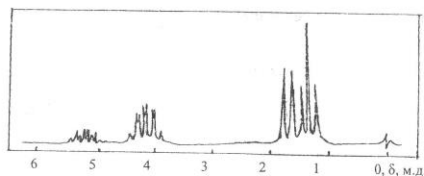


Задача 16. Для соединения $\text{CH}_3\text{-CH(CN)-O-PO(OCH}_2\text{CH}_3)_2$ дайте отнесение сигналов и объясните их мультиплетность. Нарисуйте теоретический сигнал протона CH- группы, если известно, что $J_{\text{сн-сн}_3} = 7,2$ а $J_{\text{сн-ро}} = 8,1$ Гц.

Рисунок 26.

ПМР спектр к задаче 16.

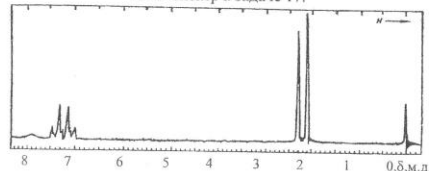
38



Задача 17. Установите структуру ацильного производного ароматического амина, спектр которого приведен на рисунке 27.:

Рисунок 27.

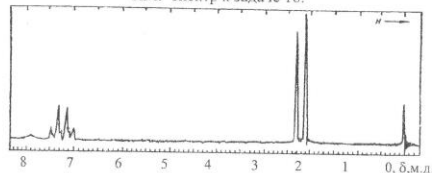
ПМР спектр к задаче 17.



Задача 18. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединения пара- $\text{NH}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-COOCH}_2\text{CH}_2\text{N(C}_2\text{H}_5)_2$:

Рисунок 28.

ПМР спектр к задаче 18.



39

Задача 19. Проведите отнесение сигналов в спектре ПМР соединения

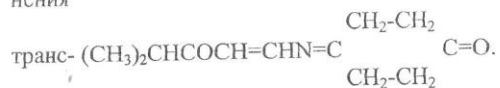
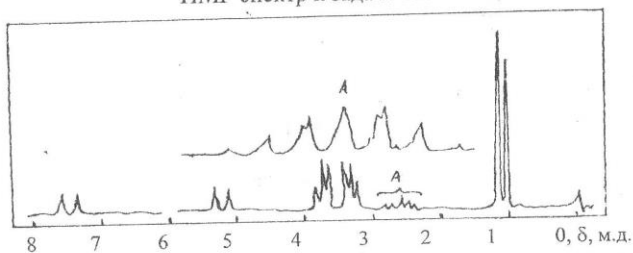


Рисунок 29.

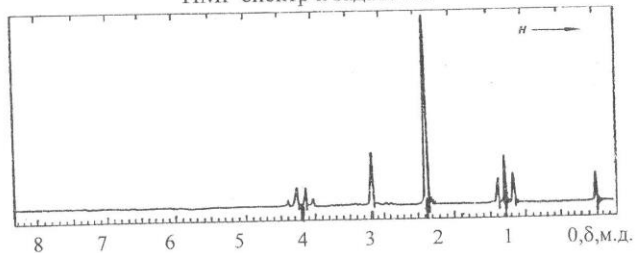
ПМР спектр к задаче 19.



Задача 20. Установите строение производного карбоновой кислоты состава $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$. Соотношение площадей сигналов: 2:2:6:3.

Рисунок 30.

ПМР спектр к задаче 20.



Вопросы для подготовки к экзамену

1. Правила отбора в ИК-спектроскопии. Обертонны.
2. Групповые колебания.
3. ИК-спектроскопия – основные положения и правила отбора.
4. Причины, вызывающие усложнение интерпретации ИК-спектров сложных молекул.
5. Эффект Зеемана для молекулы O₂.
6. Спектроскопические методы. ИК-спектроскопия. Теоретические основы метода. Активность колебаний в ИК-спектрах. Элементы симметрии молекул. Типы симметрии колебаний по отношению к элементам симметрии.
7. Анализ на влажность.
8. Рентгеноструктурный анализ
9. Неразрушающие методы контроля с помощью ультразвуковой техники
10. Определение удельного веса
11. Основы методов фотоэлектронной, рентгеновской и оже – спектроскопии.
12. Колебательная структура и интенсивность фотоэлектронных спектров.
13. Техника и методика эксперимента ФЭС, РЭС и оже – спектроскопии.
14. Структурно-аналитические применения методов фотоэлектронной спектроскопии
15. Теоретическое моделирование и объяснение химических сдвигов. Связь с эффективным зарядом и степенью окисления.
16. Применение методов фотоэлектронной спектроскопии при изучении процессов адсорбции и катализа.
17. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного резонанса.
18. Условие ЭПР. g-фактор и его значение.
19. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности.
20. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров с помощью ЭПР метода. Использование спиновых меток.
21. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности эксперимента, достоинства и ограничения метода.
22. Кристаллическое состояние вещества и типы кристаллических решеток. Понятие об обратной решетке.
23. Физика рентгеновских лучей, источники рентгеновских лучей. Дифракция рентгеновских лучей.
24. Механизм рассеяния лучей по законам классической электродинамики. Основные уравнения дифракции рентгеновских лучей.
25. Характеристика основных методов рентгеноструктурного анализа.
26. Элементы рентгеноанализа монокристаллов (метод Лауэ, метод вращения кристалла, метод Дебая).
27. Определение межплоскостных расстояний по дебаеграммам и идентификация фаз.

28. Оптимальный выбор методов для решения поставленных задач при исследовании химических процессов и материалов.
29. Эффект Мессбауэра.
30. Получение гамма-резонансных спектров. Возможности применения гамма-резонансной спектроскопии в химии.
31. Испытания на одноосное растяжение.
32. Испытания на изгиб. Испытания на сжатие.
33. Измерения ползучести. Релаксация напряжений.
34. Сопротивление ударным нагрузкам.
35. Прочность на сдвиг. Испытания на износ.
36. Усталостные испытания. Испытания на твердость.
37. Диэлектрическая прочность. Диэлектрическая постоянная и фактор потерь. Измерения электрического сопротивления.
38. Экранирование (защита) от электромагнитных радиопомех

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

5.1 Основная литература:

1. Лебухов В.И. Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс]: Учебник / В.И. Лебухов, А.И. Окара, Л.П. Павлюченкова; под ред. А.И. Окара. – СПб.: Издательство «Лань», 2012. – 480 с. : ил. – (Учебник для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1320-1. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4543#book_name
2. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии [Текст] : Учебник для студентов вузов. - М.: Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. – 683 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 658-661. - ISBN 5030034706. - ISBN 5170187602 : 358.00.
3. Буков, Н.Н. Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст] : учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар : [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с. : ил. - Библиогр. : с. 46. - 8 р. 45 к.

5.2 Дополнительная литература:

1. Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: Учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина. С.И. Карпов; под. Ред. В.Ф. Семенова. – СПб.: Издательство «Лань», 2014. – 416 с. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1638-7. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168#book_name

2. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г.М. Курамшина. - М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 392-393. - ISBN 9785947747652. - ISBN 9785030038469 : 379.50.
3. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул.- М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
4. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981.
5. Бенуэл К. Основы молекулярной спектроскопии. – М.:, 1985.
6. **Ельяшевич, Михаил Александрович.** Атомная и молекулярная спектроскопия / Ельяшевич, Михаил Александрович; Гл. ред. Е.Кудряшова. - 2-е изд. - М.: Эдиториал УРСС, 2001. - 894с.
7. **Купцов, Альберт Харисович.** Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров: [справочник] / Купцов, Альберт Харисович, Г. Н. Жижин ; А. Х. Купцов, Г. Н. Жижин. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. - 582 с.
8. **Векшин, Н. Л.** Флуоресцентная спектроскопия биополимеров: [краткий учебный курс] / Н. Л. Векшин; Н. Л. Векшин. - Пушкино: [Фотон-век], 2008. - 168 с.
9. **Беккер, Юрген.** Спектроскопия / Беккер, Юрген; Ю. Беккер; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с.
10. **Шмидт, Вернер.** Оптическая спектроскопия для химиков и биологов / Шмидт, Вернер; В. Шмидт; пер. с англ. Н. П. Ивановской; под ред. С. В. Савилова. - М.: Техносфера, 2007. - 367 с.
11. **Соболев, Валентин Викторович.** Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. 1: Введение в теорию / Соболев, Валентин Викторович; В. В. Соболев. - Москва; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2012. - 583 с.
12. **Демтредер, Вольфганг.** Современная лазерная спектроскопия : [учебное пособие] / Демтредер, Вольфганг; В. Демтредер; пер. с англ. М. В. Рябининой, Л. А. Мельникова, В. Л. Дербова; под ред. Л. А. Мельникова. - Долгопрудный: Интеллект, 2014. - 1071 с.
13. **Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков:** [учебник для химических специальностей вузов] / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - [Москва]: [Международный благотворительный фонд "Научное Партнерство"]: ICSPF Press, 2011. - 694 с.

5.3. Периодические издания:

Периодические издания: журналы РАН по химии, «Полимерные материалы», «Российский химический журнал», «Химическая промышленность», «Успехи химии».

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.scirus.com/>

2. <http://www.ihfik.lib.ru/>
3. <http://www.y10k.ru/books/>
4. <http://www.iupac.org/>
5. <http://www.anchem.ru/literature/>
6. <http://www.sciencedirect.com>
7. <http://chemteq.ru/lib/book>
8. <http://www.chem.msu.su/rus>
9. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
10. <http://www.elsevier.com/>
11. <http://www.uspkhim.ru/>
12. <http://www.strf.ru/database.aspx>

а также, интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.

Зарубежные ведущие научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.

Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

Химический редактор ChemSketch: <http://www.acdlabs.com>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Общая характеристика физических методов исследования.	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Применение абсорбционной УФ спектроскопии.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ПР
3	Колебательная спектроскопия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ПР
4	Электронный парамагнитный резонанс	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ПР
5	Ядерно-магнитный резонанс.	Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО
6	Масс-спектрометрия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям.	УО, ПР

		Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	
7	Аналитические испытания различными физическими методами.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ПР

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Office (Word, Excel), ACD Labs Chems sketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry .

8.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

1. КонсультантПлюс//www.consultant.ru
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов.
URL: <http://fcior.edu.ru/>.
3. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru/>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для материально-технического обеспечения дисциплины используется лабораторное оборудование и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, демонстрационные модели).

При выполнении лабораторных работ для реализации методик используются: спектрофотометры, инвентарь изготовления паст и таблеток исследуемых соединений, весы аналитические. При проведении лабораторных работ используются химические реактивы и посуда.

ПЭВМ уровня не ниже Pentium IV с операционной системой Windows XP / Windows 7, Компьютерная программа Hyper Chemistry.

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
2.	Семинарские занятия	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
3.	Лабораторные за-	-

	нения	
4.	Курсовое проектирование	-
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
7.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.