

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий Б1.В.ОД.2

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Камалова Д.И.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Салахов М. Х.

Протокол заседания кафедры No _____ от "_____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No _____ от "_____" _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2015

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Камалова Д.И.
Кафедра оптики и нанофотоники Отделение физики, Dina.Kamalova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью дисциплины "Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий" является изучение и понимание межмолекулярных взаимодействий и их проявления в спектрах, механизмов уширения спектральных линий и полос в жидком и твердом состояниях вещества, специфики формирования контуров линий и полос в спектрах, изучение возможностей спектроскопического эксперимента и прикладных методических вопросов спектроскопии неспецифических и специфических межмолекулярных взаимодействий.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.2 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.04.02 Физика и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Дисциплина М.2.Р.3. "Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий" относится к вариативной части профессионального цикла дисциплин подготовки студентов по направлению подготовки 011200 "Физика" (магистратура) "Физика атомов и молекул".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью адаптироваться к изменению научного профиля своей профессиональной деятельности, социокультурных и социальных условий деятельности
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать навыки составления и оформления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов и статей

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

типы межмолекулярных взаимодействий и их проявления в спектрах веществ в конденсированном состоянии; механизмы формирования спектральных контуров

2. должен уметь:

эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование для регистрации молекулярных спектров; пользоваться современными методами математической обработки, анализа и синтеза получаемой спектроскопической информации; применять на практике знания теории и методов исследований межмолекулярных взаимодействий в различных областях науки и техники;

3. должен владеть:

фундаментальными разделами молекулярной спектроскопии, необходимыми для решения научно-исследовательских задач; профессиональными знаниями для анализа и синтеза спектроскопической информации.

применять полученные знания о типах межмолекулярных взаимодействий и их проявлений в спектрах веществ в конденсированном состоянии, механизмах формирования контуров спектральных полос; пользоваться современными методами математической обработки, анализа и синтеза получаемой спектроскопической информации; применять на практике знания теории и методов исследований межмолекулярных взаимодействий в различных областях науки и техники

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Классификация межмолекулярных взаимодействий.	3	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Проявления ван-дер-ваальсовских (неспецифических) взаимодействий в молекулярных спектрах.	3	2,3,4	2	4	0	устный опрос
3.	Тема 3. Уширение спектральных полос поглощения как наиболее универсальное проявление межмолекулярных взаимодействий.	3	5,6	4	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях.	3	7	2	0	0	
5.	Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия.	3	8,9,10	2	4	0	устный опрос
6.	Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.	3	11,12,13	2	4	0	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			14	12	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Классификация межмолекулярных взаимодействий.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Специфические и неспецифические межмолекулярные взаимодействия. Модели описания взаимодействий между молекулами.

Тема 2. Проявления ван-дер-ваальсовских (неспецифических) взаимодействий в молекулярных спектрах.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Описание проявления неспецифических межмолекулярных взаимодействий в колебательных спектрах: сдвиг частот, изменение интенсивностей, индуцированные переходы, уширение полос.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Ознакомление с колебательными спектрами конкретных соединений (по указанию преподавателя) в газовой и жидкой фазе и сравнение их на предмет проявлений межмолекулярных взаимодействий.

Тема 3. Уширение спектральных полос поглощения как наиболее универсальное проявление межмолекулярных взаимодействий.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Модель Лоренца для уширения линий в газе. Дипольный момент молекулы как случайная функция времени. Корреляционная теория формы контура. Теорема Винера-Хинчина. Стационарный случайный процесс. Эргодическая теорема. Дипольная функция корреляции и ее свойства. Столкновительная модель Лоренца с точки зрения корреляционной теории. Лоренцевский контур.

Тема 4. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Возмущение дипольного момента поглощающей молекулы в жидкости. Гипотеза Френкеля. Марковский случайные процесс. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях. Броуновское вращение молекул. Связь ширины контура с вязкостью жидкости. Локальные диполь-дипольные взаимодействия. Неоднородное уширение. Доплеровский контур спектральных линий в газе. Гауссовский контур. Спектральная диффузия.

Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Проявление водородной связи в инфракрасных спектрах. Комплексы с межмолекулярной водородной связью. Внутримолекулярная водородная связь. Примеры водородных связей.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Определение энергии водородной связи по инфракрасным спектрам разными методами (метод Беджера и Бауэра, метод Иогансена - по указанию преподавателя).

Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятие конформации. Проявления конформационной неоднородности соединений в молекулярных спектрах. Влияние межмолекулярных взаимодействий на параметры конформационного равновесия.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Установление конформационной неоднородности конкретных низкомолекулярных соединений по их колебательным спектрам (при изменении агрегатного состояния, температуры, полярности среды - по указанию преподавателя).

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Проявления ван-дер-ваальсовских (неспецифических) взаимодействий в молекулярных спектрах.	3	2,3,4	подготовка к устному опросу	14	устный опрос
5.	Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия.	3	8,9,10	подготовка к устному опросу	16	устный опрос
6.	Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.	3	11,12,13	подготовка к устному опросу	16	устный опрос
	Итого				46	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Технологии курса - лекции (14 часов), практические занятия в виде работы с колебательными спектрами, устного опроса и отчетов о работе - 12 часов. 46 часов выделено на самостоятельную работу студентов с использованием научной литературы и интернета.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Классификация межмолекулярных взаимодействий.

Тема 2. Проявления ван-дер-ваальсовских (неспецифических) взаимодействий в молекулярных спектрах.

устный опрос , примерные вопросы:

Виды проявления универсальных взаимодействий в колебательных спектрах. Как изменяется ширина полос поглощения при переходе из газа в жидкость. Как изменяется интенсивность колебательных полос поглощения при смене полярности растворителя. Модели Кирквуда, Онзагера.

Тема 3. Уширение спектральных полос поглощения как наиболее универсальное проявление межмолекулярных взаимодействий.

Тема 4. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях.

Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия.

устный опрос , примерные вопросы:

Примеры комплексов с водородной связью. Энергия образования водородной связи для молекулярных комплексов. Использование правила Иогансена. Отличие внутримолекулярной водородной связи от межмолекулярной по ИК-спектрам. Связь сдвига полос поглощения с энергией образования водородной связи.

Тема 6. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.

устный опрос , примерные вопросы:

Способы установления конформационной неоднородности соединения по ИК-фурье-спектрам. Влияние универсальных межмолекулярных взаимодействий на конформационное равновесие. Термодинамические параметры конформационного равновесия как характеристика межмолекулярных взаимодействий. Вклады различных типов межмолекулярных взаимодействий в разность энергий конформаций.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

1. Классификация и проявление ван-дер-ваальсовских взаимодействий в колебательных спектрах.
2. Ширина спектральных полос поглощения.
3. Основные положения корреляционной теории формы линии.
4. Модель Лоренца с точки зрения корреляционной теории.
5. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях.
6. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение.
7. Определение разности энтропий и энтальпий конформаций по ИК спектрам.
8. Влияние водородной связи на ИК спектры поглощения.
9. Проявление ван-дер-ваальсовских взаимодействий в ИК спектрах.
10. Определение энергии водородной связи методом ИК спектроскопии.

7.1. Основная литература:

1. Межмолекулярные взаимодействия : физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И. Г. Каплан. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 . 394 с.
2. Литвин, Ф.Ф. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Ф.Ф. Литвин, В.Т. Дубровский , Р. А. Хатыпов, К. В. Неверов; Под ред. Ф.Ф.Литвина - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 263 с. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=444657>

7.2. Дополнительная литература:

1. Камалова, Д.И. ИК-спектроскопия водородной связи / Д.И. Камалова. Казань: Казанский (Приволжский) Федеральный университет, 2008. - 19 с.
2. Конформационные зонды в изучении локальной подвижности полимеров / Камалова Д.И., Ремизов А.Б., Салахов М.Х. Москва : Физматкнига, 2008 .

7.3. Интернет-ресурсы:

American Institute of Physics - <http://scitation.aip.org/>
Издательство Elsevier - <http://www.sciencedirect.com/>
Научная электронная библиотека - <http://www.elibrary.ru>
Электронная библиотека - <http://www.knigafund.ru/>
Электронная библиотечная система - www.studmedlib.ru

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Лекционная аудитория со стандартным проекционным оборудованием и лаборатория по молекулярной спектроскопии.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе Физика атомов и молекул .

Автор(ы):

Камалова Д.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х. _____

"__" _____ 201__ г.