

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. Талорский Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий М2.В.3

Направление подготовки: 011200.68 - 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 63917

Казань

2017

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 "М2.В.3 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к вариативной части. 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
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способность эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способность применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

типы межмолекулярных взаимодействий и их проявления в спектрах веществ в конденсированном состоянии; механизмы формирования контуров спектральных линий и полос; принципы построения современных спектрофотометров и спектроанализаторов;

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.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания о типах межмолекулярных взаимодействий и их проявлений в спектрах веществ в конденсированном состоянии, механизмах формирования контуров спектральных линий и 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 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. Введение. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Модели описания взаимодействий между молекулами.	3	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Проявления ван-дер-ваальсовских (неспецифических) взаимодействий в молекулярных спектрах.	3	2,3	2	2	0	
3.	Тема 3. Ширина спектральных полос поглощения.	3	4,5	2	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. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение.	3	6	2	0	0	
5.	Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия. ИК-спектроскопия водородной связи	3	7,8	1	2	0	
6.	Тема 6. Особенности аппаратуры для измерений в инфракрасной области спектра.	3	9	2	0	0	
7.	Тема 7. Приборы с интерференционной селективной модуляцией светового потока.	3	10,11	2	2	0	
8.	Тема 8. Непрерывно действующие автоматические ИК-анализаторы.	3	12	1	0	0	
9.	Тема 9. Прикладные и методические вопросы спектроскопического эксперимента.	3	13,14	0	2	0	
10.	Тема 10. Некоторые применения молекулярной спектроскопии для исследования веществ в жидком и твердом состояниях.	3	15,16	0	2	0	
11.	Тема 11. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.	3	17,18	0	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	Зачет
	Итого			14	12	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Модели описания взаимодействий между молекулами.

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)):

Проявления неспецифических межмолекулярных взаимодействий в колебательных спектрах.

практическое занятие (2 часа(ов)):

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

Тема 3. Ширина спектральных полос поглощения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Корреляционная теория формы линии. Столкновительная модель Лоренца с точки зрения корреляционной теории.

Тема 4. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение.

Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия. ИК-спектроскопия водородной связи

лекционное занятие (1 часа(ов)):

практическое занятие (2 часа(ов)):

Специфические межмолекулярные взаимодействия. Проявление внутри- и межмолекулярной водородной связи в инфракрасных спектрах.

Тема 6. Особенности аппаратуры для измерений в инфракрасной области спектра.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Источники и приемники излучения. Особенности оптических систем. Способы устранения рассеянного света.

Тема 7. Приборы с интерференционной селективной модуляцией светового потока.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Фурье-спектрометры. Связь интерферограммы и спектра. Некоторые типы фурье-спектрометров и их основные преимущества. Выигрыши Фелжетта и Жакино.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Фурье-спектрометры. Некоторые типы фурье-спектрометров и их основные преимущества.

Тема 8. Непрерывно действующие автоматические ИК-анализаторы.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Принципы построения и измерительные схемы промышленных анализаторов.

Тема 9. Прикладные и методические вопросы спектроскопического эксперимента.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Пробоподготовка образцов в различных агрегатных состояниях. Техника исследования микрообразцов. Метод нарушенного полного внутреннего отражения.

Тема 10. Некоторые применения молекулярной спектроскопии для исследования веществ в жидком и твердом состояниях.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Некоторые применения молекулярной спектроскопии для исследования веществ в жидком и твердом состояниях.

Тема 11. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Спектроскопические методы изучения конформационных равновесий и влияния на них среды.

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	Изучение экспериментальных ИК-спектров конкретных веществ (по указанию преподавателя).	6	устный опрос
3.	Тема 3. Ширина спектральных полос поглощения.	3	4,5	Сравнение ИК-полос поглощения по их ширине для веществ в газообразном и жидком состояниях	4	устный опрос
5.	Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия. ИК-спектроскопия водородной связи	3	7,8	Определение энергии водородной связи по ИК-фурье-спектрам	6	доклад
6.	Тема 6. Особенности аппаратуры для измерений в инфракрасной области спектра.	3	9	Ознакомление с особенностями схем приборов для ближнего, среднего и дальнего диапазонов ИК-спектра	6	устный опрос
7.	Тема 7. Приборы с интерференционной селективной модуляцией светового потока.	3	10,11	Работа с ИК-тьютором (IR Tutor)	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Прикладные и методические вопросы спектроскопического эксперимента.	3	13,14	Практическое ознакомление с методиками приготовления проб, регистрации ИК-спектров поглощения, предв	6	отчет
10.	Тема 10. Некоторые применения молекулярной спектроскопии для исследования веществ в жидком и твердом состояниях.	3	15,16	Подготовка рефератов по конкретным приложениям молекулярной спектроскопии	6	реферат
11.	Тема 11. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.	3	17,18	Изучение межмолекулярных взаимодействий в конформационном анализе по ИК-фурье-спектрам	6	устный опрос
	Итого				46	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Технологии курса - лекции (14 часов), практические занятия в виде докладов студентов, опросов, рефератов и ознакомление со спектроскопическим оборудованием (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. Введение. Классификация межмолекулярных взаимодействий. Модели описания взаимодействий между молекулами.

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

устный опрос , примерные вопросы:

Конкретные примеры проявления неспецифических межмолекулярных взаимодействий в молекулярных спектрах.

Тема 3. Ширина спектральных полос поглощения.

устный опрос , примерные вопросы:

Элементы корреляционной теории формы спектральных линий и полос. Модель Лоренца с точки зрения корреляционной теории.

Тема 4. Механизмы уширения колебательных переходов в жидкостях. Локальные диполь-дипольные взаимодействия и неоднородное уширение.

Тема 5. Специфические межмолекулярные взаимодействия. ИК-спектроскопия водородной связи

доклад , примерные вопросы:

Проявления водородной связи в ИК-спектрах жидкостей. Определение энергии образования водородной связи по ИК-спектрам (разные методы по указанию преподавателя).

Тема 6. Особенности аппаратуры для измерений в инфракрасной области спектра.

устный опрос , примерные вопросы:

Оптические схемы спектрометров для ближней, средней и дальней инфракрасной областей спектра

Тема 7. Приборы с интерференционной селективной модуляцией светового потока.

устный опрос , примерные вопросы:

Принципы фурье-спектрометров, их преимущества по сравнению с дифракционными и дисперсионными приборами.

Тема 8. Непрерывно действующие автоматические ИК-анализаторы.

Тема 9. Прикладные и методические вопросы спектроскопического эксперимента.

отчет , примерные вопросы:

Пробоподготовка, выбор образца, применение крио- и термостатирования, выбор методики исследования

Тема 10. Некоторые применения молекулярной спектроскопии для исследования веществ в жидком и твердом состояниях.

реферат , примерные темы:

Применение прикладной инфракрасной спектроскопии в фармацевтике, парфюмерии, охране окружающей среды и др.

Тема 11. Межмолекулярные взаимодействия в конформационном анализе.

устный опрос , примерные вопросы:

Установление конформационной неоднородности соединения по ИК-фурье-спектрам.

Определение разности энтальпий конформаций конкретного конформационно-неоднородного соединения (по указанию преподавателя) по ИК-фурье-спектрам.

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. Основные преимущества фурье-спектрометров
8. Расчет барьеров внутреннего вращения по частотам торсионных колебаний.
9. Принципиальная схема фурье-спектрометра.
10. Определение разности энтропий и энтальпий конформаций по ИК спектрам.
11. Способы отнесения ИК полос поглощения к различным конформерам.
12. Особенности аппаратуры для дальней ИК области.
13. Влияние водородной связи на ИК спектры поглощения.
14. Принципы построения промышленных анализаторов.
15. Проявление ван-дер-ваальсовских взаимодействий в ИК спектрах.
16. Метод нарушенного полного внутреннего отражения в ИК спектроскопии.
17. Характеристические частоты и структурно-групповой анализ.

18. Определение энергии водородной связи методом ИК спектроскопии.

7.1. Основная литература:

Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии, Камалова, Дина Илевна; Салахов, Мякзюм Халимуллович, 2009г.

Столкновения быстрых многозарядных ионов с атомами и молекулами, Матвеев, Виктор Иванович; Макаров, Дмитрий Николаевич, 2013г.

Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы,

Издательство: "Бином. Лаборатория знаний", 2012, 394 стр.

<http://e.lanbook.com/view/book/8690/>

7.2. Дополнительная литература:

ИК-спектроскопия водородной связи, Камалова, Дина Илевна, 2008г.

Конформационные зонды в изучении локальной подвижности полимеров, Камалова, Дина Илевна; Ремизов, Александр Борисович; Салахов, Мякзюм Халимуллович, 2008г.

Молекулярная спектроскопия биологических сред, Сидоренко, Владимир Михайлович, 2004г.

М.Х. Салахов, С.С. Харинцев. Математическая обработка и интерпретация спектроскопического эксперимента / М.Х. Салахов, С.С. Харинцев. - Казань, 2001. 238 с., из фонда кафедры оптики и нанофотоники, 20 экземпляров

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 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика атомов и молекул.

Автор(ы):

Камалова Д.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Салахов М.Х. _____

"__" _____ 201__ г.