

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



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 6158914

Казань

2014

## 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
ОК-5 (общекультурные компетенции)	способностью порождать новые идеи (креативность)
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способность применять на практике базовые профессиональные навыки
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 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.

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 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

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Уширение спектральных полос поглощения как наиболее универсальное проявление межмолекулярных взаимодействий.	3	5,6	4	0	0	
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. Потенциал Леннард-Джонса, Штокмайера.

Диполь-дипольные, индукционные, дисперсионные взаимодействия. Модель Онзагера.

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

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Описание проявления универсальных межмолекулярных взаимодействий в колебательных спектрах. Сдвиг частот колебаний молекул при переходе из газа в жидкость. Изменение интенсивностей полос поглощения при смене агрегатного состояния вещества.

Индукцированные переходы. Уширение полос поглощения как инструмент изучения межмолекулярных взаимодействий.

###### **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. 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:

Вышеприведенные вопросы и задания ведут к развитию следующих компетенций: ОК-1, ОК-5, ПК-1, ПК-2, ПК-5, ПК-6.

Примерные вопросы к зачету:

1. Классификация и проявление ван-дер-ваальсовских взаимодействий в колебательных спектрах.
2. Уширение спектральных полос поглощения, вызванное межмолекулярными взаимодействиями.
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:

Каплан, И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы: научное издание / И. Г. Каплан; пер.: Д. С. Безруков, И. Г. Рябинкин ; ред. пер. Н. Ф. Степанов ? Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 394 с. <http://e.lanbook.com/view/book/8690/>

Камалова, Д.И. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии / Д.И. Камалова, М.Х. Салахов. ? Казань: Казанский (Приволжский) Федеральный университет, 2009. - 167 с.

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:

Камалова, Д.И. ИК-спектроскопия водородной связи / Д.И. Камалова. ? Казань: Казанский (Приволжский) Федеральный университет, 2008. - 19 с.

Камалова, Д.И. Конформационные зонды в изучении локальной подвижности полимеров / Д.И. Камалова, А. Б. Ремизов, М.Х. Салахов. ? Казань: Казанский (Приволжский) Федеральный университет, 2008. - 157 с.

### 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](http://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.