

# Молекулярная спектроскопия

**Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю) и методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модулю)**

Изучение дисциплины предусматривает выполнение практических работ в специальных практикуме по Спектроскопическим методам анализа

## Методические указания к практическим занятиям

**Практические занятия** призваны закрепить теоретические знания студентов и познакомить их с методами решения конкретных задач, возникающих при практическом применении химических знаний.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование практических занятий (семинаров)
1	Область молекулярной спектроскопии. Физические свойства света.	природа спектров. Электронные спектры молекул.
2	строение молекул. Связь со спектральными характеристиками	Вращательные спектры. Колебательные спектры
3	УФ-спектроскопия	УФ-спектры органических веществ.
4	Спектрофотокolorиметрия	Выбор оптимальных условия для фотометрирования. <b>контрольная работа № 1</b>
5	спектрофлуориметрия	анализ смеси красителей методом спектрофлуориметрии. разделение спектров флуоресценции при их наложении
6	ИК-спектроскопия	пробоподготовка для ИК-спектроскопии. анализ пленок ИК-спектроскопией
7	спектроскопия комбинационного рассеяния	анализ солей и органических веществ методом СКР
8	метрология молекулярной спектроскопии	анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии
9	анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии	анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии

Методические материалы по теории и технике эксперимента для практических работ, перечень контрольных вопросов и заданий изложены в методических разработках, которые выдаются студентам в электронном виде перед каждой работой:

1. Фадейкина И.Н., Полотнянко Н.А. Инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием
2. Моржухина С.В., Кузьмина О.К. Флюориметрия
3. Моржухина С.В. Исследование строение веществ и их идентификация методом спектроскопии комбинационного рассеяния
4. Моржухина С.В. Электронная спектроскопия

## Методические материалы для преподавателей

Методическая модель преподавания дисциплины основана на применении активных методов обучения. Принципами организации учебного процесса являются:

- активное участие обучающихся в учебном процессе;
- проведение практических занятий, определяющих приобретение навыков решения проблем;

- приведение примеров применения изучаемого теоретического материала к реальным практическим ситуациям.

Используемые методы преподавания: лекционные занятия с использованием мультимедиа презентаций, индивидуальные и групповые задания при проведении практических занятий. Индивидуальные задания подбираются студентам с учетом из работы над темами НИР.

Для более глубокого изучения предмета преподаватель предоставляет студентам информацию о возможности использования Интернет-ресурсов по разделам дисциплины.

При наличии академических задолженностей по практическим занятиям, связанных с их пропусками преподаватель вправе выдать задание студенту в виде реферата по пропущенной теме занятия.

### **Методические материалы по организации самостоятельной работы студентов**

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 74 часа, из них часть часов отводится на выполнение работ по индивидуальному заданию.

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- изучение отдельных разделов тем дисциплины
- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к практическим занятиям;
- выполнение индивидуальных практических домашних работ с последующей их защитой
- работу с Интернет-источниками.

Программой дисциплины предусмотрено выполнение практических работ. Для выполнения практических работ необходимо получить у преподавателя индивидуальное задание, произвести все необходимые расчеты, получить допуск к работе. После выполнения практической работы необходимо оформить отчет и защитить практическую работу.

Кроме этого, запланировано выполнение работ по индивидуальным заданиям. Каждое задание после выполнения работы необходимо защитить.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе.

По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

- **Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций**

### **Материалы для промежуточной аттестации**

#### перечень вопросов, выносимых на зачет

1. Понятие спектральных методов анализа. Прямая и обратная задача физического метода исследования. Виды электромагнитного излучения. Основные характеристики электромагнитного излучения. Свойства света.
2. Электромагнитный спектр. Постулаты Бора. Виды взаимодействия света с веществом. Виды спектров. Виды спектральных методов анализа. Виды исследований в спектроскопии.
3. Происхождение спектров. Система энергетических состояний атома и атомные спектры. Вырождение состояний. Правила отбора электронных переходов в атоме.
4. Потенциальная кривая молекулы водорода.
5. Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля. Примеры строения молекул двухатомных и сложных органических.
6. Энергия молекул. Описание уровней энергии в двухатомной молекуле. Квантовомеханическая модель электронных колебательных и вращательных уровней в двухатомной молекуле. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Связь со спектрами.
7. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Потенциальные кривые, построенные по обеим моделям. Возможные переходы и связь со спектрами.
8. Спектры молекул. Возможные типы переходов молекул из одних энергетических состояний в другие.
9. Взаимодействие излучения с веществом. Однофотонные и двухфотонные переходы.
10. Спектральные линии.
11. Правила отбора для двухатомных молекул.
12. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
13. вращательные спектры двухатомных молекул
14. Электронно-колебательно- вращательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.
15. Энергетические состояния многоатомных молекул.

## Материалы для текущего контроля

### Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы:

- Спектрам поглощения в ультрафиолетовой области спектра соответствуют :
  - электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
  - колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
  - электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
  - вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.
- Электронные переходы в молекулах проявляются в ультрафиолетовой и видимой областях спектра примерно от 100 до 1000 нм. Какова энергия этих переходов в  $\text{см}^{-1}$  ?
  - 10 – 100 ;
  - 100 – 1000 ;
  - 10000 – 100000 ;
  - 10 – 100000.
- Электронные спектры возникают при взаимодействии вещества :
  - с гамма-излучением;
  - с видимым светом ;
  - с радиоволнами ;
  - с ИК-излучением ;
  - с УФ-излучением.
- Какие электронные переходы запрещены по спину :
  - синглет-синглетные ;
  - синглет-триплетные ;
  - триплет-триплетные ;
  - для электронных переходов нет запрета по спину.
- Какова мультиплетность электронного состояния молекулы, при котором спины двух электронов параллельны :
  - 1/2 ;
  - 1 ;
  - 2 ;
  - 3.
- Среди приведенных ниже групп найдите ауксохромы :
  - $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$  ;
  - $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}$  ;
  - $-\text{NH}_2$  ;
  - $\text{C}=\text{C}$  ;
  - $\text{C}=\text{O}$  ;
  - $-\text{OH}$ .
- Увеличение цепи сопряжения полиенов приводит в УФ-спектре к :
  - батохромному сдвигу и гипохромному эффекту;
  - батохромному сдвигу и гиперхромному эффекту;
  - гипсохромному сдвигу и гипохромному эффекту;
  - гипсохромному сдвигу и гиперхромному эффекту.
- Видимый свет представляет собой электромагнитное излучение, занимающее интервал спектра от 400 до 800 нм. Объясните, почему многие вещества имеющие максимум поглощения ниже 400 нм интенсивно окрашены.
- Электронные спектры поглощения бутанона-2 и бутен-3-она-2 в области 220–350 нм имеют один максимум: при 270 нм ( $\epsilon \approx 17$ ) — спектр А и при 315 нм ( $\epsilon \approx 28$ ) — спектр Б. Какому веществу принадлежит каждый спектр ?
- В электронном спектре поглощения трифениламина имеется полоса при 227 нм в нейтральном растворе. Объясните, почему данная полоса исчезает в кислом растворе.
- Можно ли по электронным спектрам поглощения контролировать течение следующих реакций : а) диеновой конденсации; б) альдольной конденсации; в) азосочетания; г) образования ацеталей; д) гидрирования аренов.
- Оптическая плотность водного раствора соединения X при  $\lambda = 250$  нм составляет 0,542 при концентрации 0,1 моль/л в кювете с толщиной поглощающего слоя 1 см. Коэффициент поглощения соединения X равен 9000. Известно, что X реагирует по уравнению:  $\text{X} = \text{Y} + \text{Z}$ . Найдите константу равновесия этой реакции, если известно что соединения Y и Z не поглощают в области поглощения X.
- При гидролизе 5-метил-3-хлор-1,4-гексадиена были выделены два изомерных спирта. Электронный спектр поглощения одного из них содержит полосу при 223 нм ( $\lg \epsilon = 4,4$ ), а другого — полосу при 236 нм ( $\lg \epsilon = 4,3$ ). Каково их строение ?
- При нагревании образца этилциклопентадиена ( $\lambda_{\text{макс}} = 247\text{нм}$ ,  $\epsilon \approx 3400$ ) в течении 0,5; 1,5; 2,5; 4 ч в спектре поглощения наблюдается уменьшение мольного коэффициента поглощения и составляет 2800, 2050, 1650, 1100 соответственно. Определите для

каждого момента времени степень превращения этилциклопентадиена в его димер, если последний прозрачен при 247 нм.

15. Какие изменения в электронном спектре поглощения акролеина  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHO}$  [ $\lambda_{\text{макс}} = 203 \text{ нм}$  ( $\epsilon \approx 12000$ ),  $\lambda_{\text{макс}} = 345 \text{ нм}$  ( $\epsilon \approx 20$ )] следует ожидать при разбавлении этанолом, содержащим следы кислоты ?
16. Пропускание водного раствора фумарата натрия при  $\lambda = 250 \text{ нм}$  и  $25^\circ\text{C}$  составляет 19,2 % для  $5 \cdot 10^{-4}$  моль/л раствора в кювете толщиной 1 см. Вычислите оптическую плотность и молярный коэффициент поглощения.
17. Как будет изменяться УФ-спектр поглощения фенола в водном растворе при изменении кислотности среды от сильнокислой до щелочной?
18. Для ряда линейных полициклических ароматических углеводородов общей формулы  $\text{C}_n\text{H}_{0,5n+3}$  (где  $n = 14, 18, 22$ ) в электронных спектрах поглощения имеются максимумы поглощения при 380 нм ( $\epsilon \sim 7900$ ), 480 нм ( $\epsilon \sim 11000$ ) и 580 нм ( $\epsilon \sim 12600$ ). Соотнесите данные спектров с формулами кислот.
19. Электронные спектры поглощения метиловых эфиров бензойной и фенилуксусной кислот имеют в интервале 220 – 350 нм имеют один максимум: при 260 нм ( $\lg \epsilon \sim 2,2$ ) — спектр А и при 285 нм ( $\lg \epsilon \sim 3,1$ ) — спектр Б. Какому веществу соответствует каждый спектр ?
20. Для ряда непредельных кислот  $\text{CH}_3(\text{CH}=\text{CH})_n\text{COOH}$  (где  $n = 2, 3, 4$ ) в электронных спектрах поглощения имеются максимумы поглощения при 260 нм ( $\epsilon \sim 6500$ ), 310 нм ( $\epsilon \sim 9000$ ) и 330 нм ( $\epsilon \sim 11000$ ). Соотнесите данные спектров со структурами кислот.
21. Какие изменения в электронном спектре поглощения циклопропанона следует ожидать после гидратации?
22. Электронные спектры поглощения бутадиена-1,3 и гексадиена-2,4 в области 200–250 нм имеют один максимум : при 217 нм ( $\epsilon \sim 21000$ ) — спектр А и при 227 нм ( $\epsilon \sim 23000$ ) — спектр Б. Какому веществу принадлежит каждый спектр?
23. В каком растворителе,  $\text{CCl}_4$  или  $\text{CH}_3\text{CN}$ , больше вероятность зарегистрировать тонкую колебательную структуру электронного перехода растворенного соединения? Почему?
24. Можно ли отличить методами оптической спектроскопии внутри- и межмолекулярную водородную связь? Аргументируйте ответ конкретными примерами.
25. В электронном спектре поглощения окиси мезитила  $\text{CH}_3\text{COCH}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$  (в гептане) в области от 200 до 400 нм имеются две полосы поглощения с максимумами при  $\lambda = 230 \text{ нм}$  и  $\lambda = 327 \text{ нм}$ , обусловленные соответственно  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $n \rightarrow \pi^*$  переходами. Объясните, какие изменения произойдут в спектре после замены гептана на более полярный растворитель.
26. Какие характерные изменения произойдут в электронном спектре поглощения ацетоуксусного эфира после замены растворителя: гексана на воду?
27. Какие изменения произойдут в УФ-спектре циклопентанона после его обработки литийалюминийгидридом?
28. Какому из непредельных изомерных спиртов  $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}$  принадлежит электронный спектр поглощения с максимумом при 223 нм ( $\epsilon = 14000$ ) ?
- 1)  $\text{CH}\equiv\text{CCH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$                       2)  $\text{CH}\equiv\text{CCH}(\text{OH})\text{CH}=\text{CHCH}_3$   
3)  $\text{CH}\equiv\text{CCH}=\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$                               4)  $\text{CH}_2=\text{CHCH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$   
5)  $\text{CH}_2=\text{CHC}(\text{CH}_3)(\text{OH})\text{C}\equiv\text{CH}$

29. По мере увеличения числа сопряженных двойных связей поглощение все более сдвигается в сторону длинных волн. Соединения А, Б, В имеют формулу  $\text{C}_5\text{H}_8$  и при гидрировании они превращаются в н-пентан. В их УФ-спектрах имеются следующие максимумы: А — 176 нм, Б — 211 нм, В — 217 нм.

Вероятная формула соединения В.....?

**Варианты ответов:**

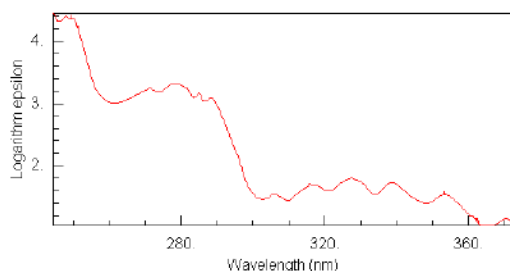
1. Пентан. 2. 2-метилбутадиен-1,3.  
3. Пентен-1. 4. Пентен-2.

30. Полоса переноса заряда для изомеров о-, м-, п-диметиламино-бензальдегида находится в области 327, 262, 262 нм. Мезоформула для изомера с полосой переноса заряда в 327 нм имеет вид .....
31. .... эффект обуславливает смещение полосы  $n \rightarrow \sigma^*$  триэтиламина батохромно (217 нм) по сравнению с метиламином, см табл. ниже (задание дает преподаватель).

Соединение	$\lambda$ , нм (lg $\epsilon$ ) $\sigma \rightarrow \sigma^*$	$\lambda$ , нм (lg $\epsilon$ ) $n \rightarrow \sigma^*$
CH <sub>3</sub> OH	150	183 (2,18)
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O	150	184 (3,0)
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> SH	192 (3,9)	225 (2,2)
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> S	210 (2,0)	229 (2,2)
R-S-S-R	200	250 (2,5)
CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	173	213 (2,3)
(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> N	199	227 (2,90)
CH <sub>3</sub> Cl	150	173 (2,30)
CH <sub>3</sub> Br	—	204 (2,30)
CH <sub>3</sub> I	150—210	258 (3,50)

32. Наиболее характерным поглощением для бензола является полоса в области .....нм с ярко выраженной колебательной структурой.

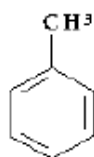
33. В спектре бензальдегида наблюдаются две полосы поглощения, относящиеся к электронным переходам ..... (соответственно), и электронный переход  $n \rightarrow \pi^*$  в области 320—350 нм и .....



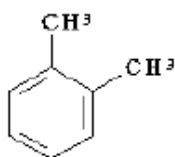
34. На основе таблицы для дизамещенных бензола (см. ниже) рассмотрите отнесение полос к электронным переходам, например орто-нитрофенола ..... (задание дает преподаватель).

X	Y	Положение заместителей	макс, нм (lg )	
ОН	ОН	1,2	214 (3,80),	276 (3,36)
ОН	ОН	1,3	216 (3,83),	274 (3,30)
ОН	ОН	1,4	225 (3,78),	295 (3,49)
ОН	NO <sup>2</sup>	1,2	230 (3,59),	278 (3,81),
ОН	NO <sup>2</sup>	1,3	274 (3,78),	333 (3,29)
ОМeCHO		1,2	254 (4,00),	322 (3,66)
ОМeCHO		1,3	252 (3,92),	314 (3,45)
NH <sup>2</sup>	NO <sup>2</sup>	1,2	229 (4,20),	275 (3,70),
NH <sup>2</sup>	NO <sup>2</sup>	1,3	235 (4,20),	373 (3,18)
COOH	COOH	1,2	230 (3,96),	280 (3,02)
COOH	COOH	1,3	230 (4,08),	282 (2,98)

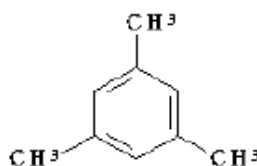
35. Расположите максимумы поглощения для соединений в соответствии с их строением (279, 263, 261, 266 нм).



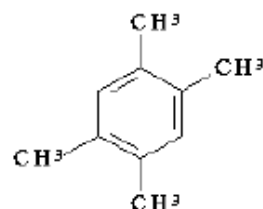
толуол



о-ксилол

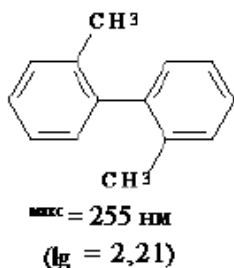


мезитилен



дурол

36. Причиной аналогии спектра рассматриваемого ниже соединения с моно-замещенными производными бензола является пространственные затруднения, обусловленные .....



37.. Причиной bathochromного сдвига полосы  $\pi \rightarrow \pi^*$  в стироле является 248, 280 и 290 нм.....

38.. Bathochromное смещение В-полосы бензола обусловлено .....

39. На чем основан метод спектрофлуориметрии

40. Почему для уранина и родамина С величину  $\Delta\lambda$  принять брать равной 25 нм.

41. Как проходит свет в приборе при анализе пробы.

42. По какому методу рассчитывают концентрацию шифрованной пробы.

43. В каких растворителя у родамина С устойчива лактонная форма, а в каких проявляется двойная флуоресценция.

44. Дайте оценку порядку величины электронной, колебательной и вращательной энергий

45. Что представляет собой гантельная модель вращающейся двухатомной молекулы?

46. Опишите модель гармонического осциллятора

47. Какой вид имеют волновые функции гармонического осциллятора и распределение вероятностей?

48. В чем причина ангармоничности колебаний? Каково выражение для энергии осциллятора с учетом ангармоничности?

49. Каковы правила отбора для колебательно-вращательных уровней?

50. Какова классификация молекулярных электронных состояний?

51. Сформулируйте принцип Франка-Кондона

52. Чем определяются относительные интенсивности электронно-колебательных полос?

53. Опишите колебательную структуру электронных переходов

54. Опишите вращательную структуру электронно-колебательных полос

55. В чём отличие рассеяния света от люминесценции?

56. Чем отличаются упругое и неупругое рассеяния?

57. Почему интенсивности антистоксовых линий в КР спектре меньше по сравнению с интенсивностью стоксовых линий?

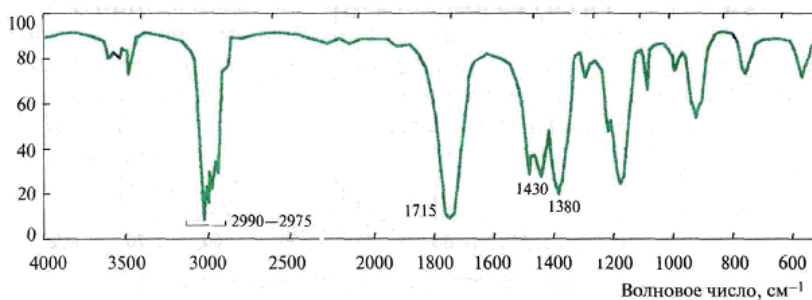
58. . На что влияет время экспозиции?

59. Почему в ИК диапазоне люминесценция обычно меньше?

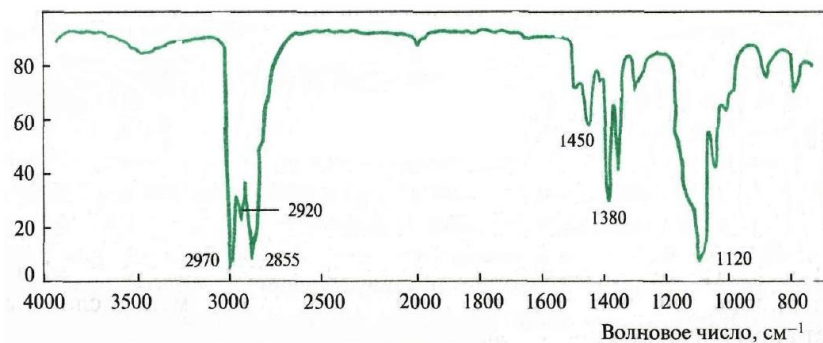
60. Объясните суть комбинационного рассеяния? Почему оно значительно слабее релеевского?

61. Если при релеевском рассеянии, рассеяние происходит мгновенно (без задержки), на той же длине волны, что же тогда меняется в фотоне?

62. Почему спектр КР строится, беря за ноль длину волны лазера?
63. Почему от единиц длины волны «нм» переходят к см<sup>-1</sup>?
64. Чем метод комбинационного рассеяния отличается от метода ИК-спектроскопии? Если и там и там можно зарегистрировать, например, колебательный переход 3000см<sup>-1</sup>?
65. 4000см<sup>-1</sup> это сколько в нм.
66. Из-за чего может быть затруднен анализ КРС спектра?
67. Какие основные параметры пика КРС спектра? За что они отвечают?
68. Какие колебания молекулы СО<sub>2</sub> проявляются в ИК-спектре, а какие в КР-спектре ?
69. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у тетраэдрической молекулы СН<sub>4</sub> ?
70. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у линейной молекулы HCN и угловой — Н<sub>2</sub>О ? Одинаково ли у них число основных частот колебаний ?
71. Укажите характерные особенности колебательных спектров (ИК- и КР-) приведенных ниже молекул:
- 1) Cl<sub>2</sub> ;      2) HCl ;      3) CO ;
  - 4) CF<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub> ( только валентные колебания двойной связи ) ;
  - 5) CH<sub>3</sub>CH=CHCH<sub>3</sub> (только валентные колебания двойной связи ).
72. Проявляются ли (активны ли) колебания полярных двухатомных молекул (например HCl) в ИК-спектрах и спектрах КР ?
73. Предскажите вид колебательных спектров ( ИК- и КР-спектров ) для линейной молекулы диоксида углерода и укажите типы колебаний для данной молекулы.
74. Молекула ацетилена в основном состоянии имеет линейное строение, а в возбужденном состоянии принимает нелинейную транс-конфигурацию. Одинаково ли число основных частот колебаний этих двух состояний?
75. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O.

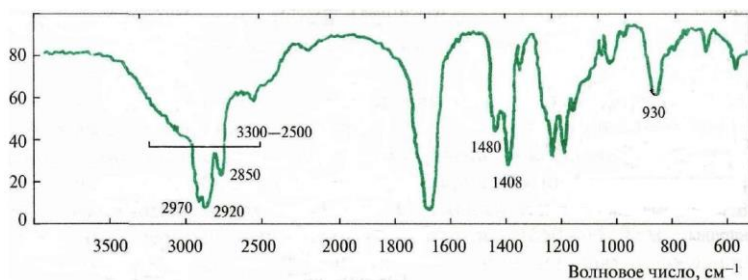


76. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>O



77. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>





### Примерная тематика домашних практических работ:

- расшифровка УФ-спектров
- расшифровка ИК-спектров
- расшифровка спектров комбинационного рассеяния

Методические материалы по теории и технике эксперимента для практических работ, перечень контрольных вопросов и заданий изложены в методических разработках, которые выдаются студентам в электронном виде перед каждой работой:

1. Фадейкина И.Н., Полотнянко Н.А. Инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием
2. Моржухина С.В., Кузьмина О.К. Флюориметрия
3. Моржухина С.В. Исследование строения веществ и их идентификация методом спектроскопии комбинационного рассеяния
4. Моржухина С.В. Электронная спектроскопия

### Содержание контрольной работы № 1

1. Понятие спектральных методов анализа. Прямая и обратная задача физического метода исследования. Виды электромагнитного излучения. Основные характеристики электромагнитного излучения. Свойства света.
2. Электромагнитный спектр. Постулаты Бора. Виды взаимодействия света с веществом. Виды спектров. Виды спектральных методов анализа. Виды исследований в спектроскопии.
3. Происхождение спектров. Система энергетических состояний атома и атомные спектры. Вырождение состояний. Правила отбора электронных переходов в атоме.
4. Потенциальная кривая молекулы водорода.
5. Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля. Примеры строения молекул двухатомных и сложных органических.
6. Энергия молекул. Описание уровней энергии в двухатомной молекуле. Квантовомеханическая модель электронных колебательных и вращательных уровней в двухатомной молекуле. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Связь со спектрами.
7. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Потенциальные кривые, построенные по обоим моделям. Возможные переходы и связь со спектрами.
8. Спектры молекул. Возможные типы переходов молекул из одних энергетических состояний в другие.

9. Взаимодействие излучения с веществом. Однофотонные и двухфотонные переходы.
10. Спектральные линии.
11. Правила отбора для двухатомных молекул.
12. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
13. вращательные спектры двухатомных молекул
14. Электронно-колебательно- вращательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.
15. Энергетические состояния многоатомных молекул.

- **Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Для контроля знаний студентов по данной дисциплине необходимо проводить текущий и промежуточный контроль.

Текущий контроль выполняется в виде приема допусков и защит практических работ, устного опроса на лекциях и практических занятиях, выполнения контрольной работы.

Промежуточный контроль проводится в виде зачета с оценкой, на котором обсуждаются теоретические и практические вопросы курса. Практическая часть частично зачитывается по результатам работ, выполненным в семестре, на основе балльно-рейтинговой системы. При рейтинговой системе все знания, умения и навыки, приобретаемые студентами в результате изучения дисциплины, оцениваются в баллах.

Оценка качества работы в рейтинговой системе является накопительной и используется для оценивания системной работы студентов в течение всего периода обучения. Максимально-возможная сумма баллов по всем видам заданий приравнивается 100 %. При этом также учитывается посещаемость занятий – 0,5 балла за посещение одного занятия продолжительностью 1 академический час, при этом максимальный балл за посещаемость равен 17. Каждое практическое задание оценивается в зависимости от сложности от 1 до 10 баллов. Окончательно задания формируются перед началом семестра преподавателем в зависимости от тем НИР студентов. Максимальный балл за каждый вид задания определяется преподавателем в зависимости от уровня сложности задания в начале семестра, проставляется в журнале успеваемости и доводится до сведения студентов.

Чтобы быть допущенным к зачету, студент обязан проделать и сдать **все** практические работы. Работы, пропущенные без уважительной причины, а также работы, не защищенные студентом в течение 2х недель после проведения практической части, оцениваются преподавателем с понижающим коэффициентом 0,5.

Преподаватель может использовать **«штрафы»** в виде уменьшения набранных баллов за пропуск лекционных занятий, за нарушение сроков выполнения учебной работы, за систематический отказ отвечать на семинарских занятиях и т.д.

Результаты работы студентов фиксируются преподавателем в журнале успеваемости. В течение семестра проводится 2 промежуточные аттестации, о результатах которых преподаватель сообщает студенту, куратору группы и заведующему кафедрой.

Если к моменту окончания семестра студент набирает не менее 55 % от максимально возможной суммы баллов, то он получает допуск к зачету.

Студент, сдающий зачет, получает баллы за зачетное задание.

Если к началу зачетной недели набранное студентом суммарное количество баллов с учетом дополнительных, составляет **менее 55 % от максимальной суммы баллов**, он не допускается к сдаче зачета. Такие студенты могут довести свой балл до необходимой суммы в течение последней (зачетной) недели семестра, написав контрольную работу по теме, за которую студент получил наименьшее количество баллов. Выполненные практические задания на зачетной неделе **не принимаются**.

Шкала выставления оценок за зачет:

% от максимальной суммы баллов	оценка
86 - 100 %	5
71-85	4
55-70	3

ТЕХНОЛОГИИ, ИСПОЛЪЗУЕМЫЕ ПРИ КОНТРОЛЕ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ

1. Проверка выполненной практической работы.
2. Защита практической работы
3. Устный опрос на лекции и практическом занятии
4. контрольная работа
5. Зачет по теоретическим и практическим вопросам

## 10. Ресурсное обеспечение

### *Основная учебная литература*

1. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Под ред. проф. Ф.Ф. Литвина. - М.: НИЦ Инфра-М, 2013. (Высшее образование: Бакалавриат). (обложка) ISBN 978-5-16-005727-9. (ЭБС ZNANIUM – [www.znanium.com](http://www.znanium.com))
2. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. - Лаборатория знаний Бином, 2013. - ISBN 978-5-94774-765-
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Общие вопросы спектроскопии. - Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2014. - ISBN 978-5-397-04524-7

### *Дополнительная учебная литература*

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений: таблицы спектральных данных. - Бином, Лаборатория знаний, 2012. - ISBN 5-94774-572-0
2. Купцов А.Х., Жижин Г.Н. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров. - Техносфера, 2013. - ISBN 978-5-94836-360-8. [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=273788](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=273788)
3. Вшивков С.А. Спектральные методы анализа. Учебн. пос., 3- изд., испр. и доп.. - Лань-Трейд, 2012. - ISBN 978-5-8114-1301-0I668
4. Васильева В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство. Учебн.пос., 1-е изд.. - Лань-Трейд, 2014. - ISBN 978-5-8114-1638-7
5. Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений. - Бином, Лаборатория знаний, 2011. - ISBN 978-5-94774-392-0
6. Алыкова Т.В. Аналитическая химия объектов: Лабораторные работы. Вопросы. Задачи: учебное пособие / Алыкова Тамара Владимировна. - М.: Кнорус; Астрахань: Астраханский университет, 2016. - 196 с. - Лит.: с. 189. - ISBN 978-5-4365-0262-5.
7. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений: таблицы спектральных данных. - Бином, Лаборатория знаний, 2012. - ISBN 5-94774-572-0
8. Марченко З. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе / Марченко Зигмунт, Бальцежак Мария; Пер.с пол. А.В.Гармаша. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. - 711с.: ил. - (Методы в химии). - Предм.указ.:с.679-698. - ISBN 978-5-94774-369-2.

## Периодические издания

- Вестник Московского университета. Серия 2, Химия : научный журнал / учредитель: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова, фак-т химии. - М. : МГУ. - Журнал, основан в ноябре 1946 года. - Выходит отдельной серией с 1960 года - Доступ к архиву статей с 1998 г. на сайте журнала: <http://www.chem.msu.su/rus/vmgu/>
- Геохимия / учредитель: РАН, отделение геологии, геофизики, геохимии и горных наук РАН [и др.]. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года академиком А.П. Виноградовым. - Содержание выпусков и аннотации статей на английском языке с 1996 г. на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>
- Журнал аналитической химии / учредитель: РАН, отделение физикохимии и технологии неорганических материалов и Институт геохимии и аналитической химии. - М. : МАИК Наука. - Журнал, основан в 1946 году. - Содержание выпусков с 1999 г. на сайте журнала: <http://www.zhakh.ru/Lists/Content/view.aspx>
- Журнал неорганической химии / учредитель: РАН, отд-ние физикохимии и технологии неорганических материалов. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года. - Содержание выпусков и аннотации статей с 1996 г. на английском языке на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>
- Заводская Лаборатория. Издательство "Тест-эл" (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Электрофоретические и хроматографические процессы [Воронежский государственный университет](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Аналитика и контроль (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Успехи химии. Издательство Журнала "Успехи химии" Известия Академии наук. Серия химическая. Издательство журнала "Известия Академии наук. Серия химическая"](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Научный вестник Новосибирского государственного технического университета Новосибирский государственный технический университет](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Сборник научных трудов Новосибирского государственного технического университета](#) Федеральная информационная система: «Единое окно доступа к информационным ресурсам»: <http://window.edu.ru/>
- [Естественные науки. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Астраханский государственный университет"](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Башкирский химический журнал ООО "Научно-исследовательский институт истории науки и техники"](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология Иркутский национальный исследовательский технический университет](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- [Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация Воронежский государственный университет](#) (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

## Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

### *Электронно-библиотечные системы и базы данных*

- Университетская библиотека онлайн – [www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru) - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- ZNANIUM – [www.znanium.com](http://www.znanium.com) -- Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- БД российских журналов East View : <http://dlib.eastview.com> - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Электронная библиотека диссертаций (ЭБД) РГБ: <http://diss.rsl.ru/> - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Реферативная и библиографическая БД Web of Science, JCR компании Thomson Reuters: <http://webofknowledge.com> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Реферативная и библиографическая БД SCOPUS: <http://www.scopus.com/home.url> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Elibrary.ru. Научная электронная библиотека (РУНЭБ) Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

### *Научные поисковые системы*

- SCIENCE INDEX на основе данных РИНЦ [http://elibrary.ru/project\\_risc.asp](http://elibrary.ru/project_risc.asp) Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Scopus <http://www.scopus.com/home.url> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Web of Science <http://webofknowledge.com> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Научная электронная библиотека РФФИ <http://www.elibrary.ru> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

### *Профессиональные ресурсы сети «Интернет»*

<http://window.edu.ru/> - Федеральная информационная система: «Единое окно доступа к информационным ресурсам»

<http://www.rsl.ru> РГБ Российская государственная библиотека

<http://ben.irex.ru> БЕН Библиотека естественных наук

<http://www.gpntb.ru> ГПНТБ Государственная публичная научно-техническая библиотека

<http://ban.pu.ru> БАН Библиотека Академии наук

<http://www.nlr.ru> РНБ Российская национальная библиотека

<http://www.elibrary.ru> Научная электронная библиотека РФФИ

<http://www.lib.msu.su> Библиотека МГУ

<http://www.kge.msu.ru> Библиотеки химической литературы

<http://www.lib.asu.ru> Электронная библиотека зарубежных изданий

<http://www.chem.asu.ru> Электронная библиотека/неорганическая химия

<http://www.chem.port.ru/>

<http://www.ars.org/portalchemistry/>

<http://www.rusanalytchem.org/> <http://www.rusanalytchem.org/>

<http://www.chem.msu.su> портал фундаментального химического образования России

<http://lib.uni-dubna.ru/biblweb/> Библиотека университета «Дубна»