

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

образовательная программа направления 020100.62 Химия
цикл общематематических и естественно-научных дисциплин, дисциплины по выбору

Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины - изложение основных явлений понятий и законов, используемых в современных физических методах исследования.

Задачи дисциплины:

- рассмотреть основные спектральные методы исследования, дать представление о прямой и обратной задачах;
- проанализировать границы применимости каждого метода;
- рассмотреть применение отдельных методов для исследования структуры и строения вещества.

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

– **знать:**

- базовую терминологию, относящуюся к рассматриваемым методам, основные понятия, законы, лежащие в основе рассматриваемых методов, их математическое выражение;
- принципы действия аппаратуры, используемой в рассматриваемых методах;
- логику постановки эксперимента с использованием рассматриваемых методов.

– **уметь:**

- использовать результаты, полученные с использованием соответствующих методов для вычисления параметров, характеризующих состояние вещества;
- проводить качественную интерпретацию результатов с целью выявления особенностей строения молекул, а так же для идентификации соединений.

– **быть способным:**

- использовать в познавательной и профессиональной деятельности рассмотренные физические методы;
- в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей;
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач.

7 семестр, зачет

Всего 100 часов, аудиторных 50

Краткое содержание

ВВЕДЕНИЕ. Физические свойства атомов и молекул. Методы определения физических свойств. Прямая и обратная задачи.

Общая характеристика методов. Взаимодействие излучения с веществом. Энергетические характеристики различных методов спектроскопии. Характеристическое время метода.

Возможности методов и области их применения.

ТЕМА 1. МЕТОД МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ. Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Основное уравнение масс-спектрометра. Системы фокусировки. Разрешающая сила масс-спектрометра.

Ионный источник. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электрическая искра и др. Ионный ток. Потенциалы появления ионов. Принцип Франка-Кондона. Типы ионов в масс-спектрах: молекулярные, осколочные, перегруппировочные, многозарядные, отрицательные.

Система напуска. Молекулярное течение газа. Детектор.

Применение масс-спектрометрии. Идентификация веществ. Изотопный эффект в масс-спектрометрии. Таблицы массовых чисел. Соотношение изотопов. Определение элементного состава вещества. Вероятность появления различных изотопсодержащих ионов. Азотное правило.

Исследование механизмов в реакциях обмена.

ТЕМА 2. МЕТОДЫ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ. Введение.

Возможности методов ИК - спектроскопии и спектроскопии КРС, их применение в химии.

Квантовомеханический подход к описанию колебательных частот и интенсивностей в колебательных спектрах многоатомных молекул.

Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК - спектрах и КРС.

Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Полуэмпирический характер задачи. Естественные колебательные координаты. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы.

Решение колебательной задачи. Нормальные колебания. Использование соображений симметрии для разделения нормальных колебаний на блоки симметрии. Характеристичность нормальных колебаний. Правила отбора в ИК – и КРС – спектроскопии.

Силовое поле молекулы, его нахождение. Силовые постоянные двухатомных молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул.

Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии.

Сравнение методов ИК – и КРС – спектроскопии, их достоинства и недостатки.

ТЕМА 3. ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ МНОГОАТОМНЫХ

МОЛЕКУЛ. Электронные состояния многоатомных молекул и их характеристики. Энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни, симметрия электронных состояний. Определение симметрии полной волновой функции как прямого произведения для одноэлектронных волновых функций в приближении МО ЛКАО. Номенклатура электронных состояний.

Классификация и отнесение электронных переходов. Классификация переходов по Малликену и Каша. Критерии отнесения полос к различным переходам. Квантовомеханическая вероятность перехода и сила осциллятора. Интенсивности

полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета различных переходов.

Применение электронных спектров поглощения в качественном, количественном и структурном анализе. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений.

ТЕМА 4. МЕТОДЫ ЯМР И ЭПР. Физические основы явлений ядерного магнитного и электронного парамагнитного резонанса. Спины и магнитные моменты ядер и электронов. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, правила отбора.

Химический сдвиг и спин – спиновое расщепление в спектрах ЯМР на ядрах водорода и углерода ^{13}C . Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин – спиновое взаимодействие ядер, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР первого порядка.

Классификация спектров ЯМР. Основы анализа сложных спектров ЯМР и применение ЯМР для идентификации органических соединений.

Техника и методика эксперимента ЯМР. Сравнение метода ЯМР с другими методами, его достоинства и ограничения.

Принципы и применения спектроскопии ЭПР.

g – фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии электрона с одним и несколькими ядрами. Число компонентов мультиплета. Распределение интенсивности. Приложения метода ЭПР в химии. Достоинства и недостатки метода.

ТЕМА 5. МЕТОД ЯКР. Электрический квадрупольный момент ядра. Взаимодействие “квадрупольного” ядра с неоднородным электрическим полем электронов. Градиент поля на ядре. Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля. Параметр асимметрии поля и уровни энергии. Приложения метода ЯКР и его возможности. Незаконченность теории.

ТЕМА 6. МЕТОД ЯДЕРНОГО ГАММА – РЕЗОНАНСА. γ - резонансная ядерная флуоресценция. Эффект Мессбауэра. Энергии испускаемых и поглощаемых γ - квантов. Доплеровское уширение и энергия отдачи. Вероятность переходов ядер и ее увеличение. Процедура получения γ - резонансных спектров. Химический сдвиг, влияние химического окружения. Квадрупольные и магнитные взаимодействия. Возможности применения γ - спектроскопии в химии и ограничения метода.

ТЕМА 7. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДИПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ МОЛЕКУЛ. Постоянный и индуцированный дипольный момент. Мольная поляризация и мольная рефракция. Уравнение Клаузиуса-Мосотти. Формула Лоренц-Лоренца. Уравнение Ланжевена-Дебая. Определение дипольного момента молекул в газах и растворах. Методы измерений дипольных моментов.

ТЕМА 8. МИКРОВОЛНОВАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ. Схема микроволнового спектрометра. Условия получения микроволнового спектра. Матричный элемент дипольного момента перехода. Правила отбора. Определение геометрических параметров молекул из микроволновых спектров.

ТЕМА 9. ГАЗОВАЯ ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ. Приближение Борна для рассеяния электронов на сферическом потенциале. Атомное рассеяние в борновском приближении. Комплексная амплитуда рассеяния электронов на атомах. Учет неупругого рассеяния.

Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний. Преобразование Фурье в газовой электронографии. Кривая радиального распределения.

Схема эксперимента. Методы расшифровки электронограмм. Возможности газовой электронографии при исследовании сложных молекул.