

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИХ ДВО РАН)

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИХ ДВО РАН

\_\_\_\_\_ академик РАН В.И. Сергиенко  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2015 г.

**ПРОГРАММА КУРСА**

**«Исследования материалов методами колебательной спектроскопии»**

Для аспирантов, проходящих обучение по направлению подготовки  
**04.06.01 - Химические науки**

**Направленность** (профиль) подготовки 02.00.04 физическая

**Квалификация** (степень) выпускника: **Исследователь. Преподаватель-исследователь**  
Форма обучения **очная**

Владивосток 2015 г.

## 1. Цели и задачи курса

Дисциплина «Исследования материалов методами колебательной спектроскопии» предназначена для обучения аспирантов основам метода инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния для исследования строения и свойств вещества. Дать слушателям достаточно полное представление о современных возможностях методов колебательной спектроскопии для исследования молекул, кристаллических и аморфных твердых тел, растворов, газов, органических и неорганических соединений, высокомолекулярных соединений, полимеров. Заложить основы для дальнейшего самостоятельного совершенствования мастерства в проведении спектроскопических исследований и анализе полученных результатов.

## 2. Требования к уровню усвоения содержания курса

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

- **иметь представление:** о месте колебательной спектроскопии в системе химических и физических наук, о природе молекулярных спектров, особенностях ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния, информации, которую можно извлечь из анализа ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния при изучении различных материалов. иметь представление о методах регистрации и возможностях приборной базы для спектроскопических измерений;
- **знать:** основные понятия и законы колебательной спектроскопии, классификацию и характеристики ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния, принципиальные возможности каждого из методов, специфику регистрации спектров материалов в различном агрегатном состоянии, кристаллических и аморфных, органических и неорганических, современные методы исследования свойств материалов методами колебательной спектроскопии, знать современные приоритетные направления и достижения для исследования соединений;
- **уметь:**(1) самостоятельно экспериментально подготовить образец для регистрации ИК-спектра и спектра комбинационного рассеяния с учетом используемого прибора и метода, освоить методики регистрации спектров с учетом используемого прибора и метода, провести интерпретацию полученных спектров, извлечь информацию о характеристиках исследуемого объекта; свободно уметь ориентироваться литературных данных по исследованию материалов методами колебательной спектроскопии.

## 3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Изучение дисциплины «Исследования материалов методами колебательной спектроскопии» аспирантами построено на базе лекций и практических занятий (семинаров).

Курс лекций включает в себя 5 разделов:

1. Предмет и задачи колебательной спектроскопии
2. Природа молекулярных спектров, особенности ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния
3. Информации, которую можно извлечь из анализа ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния при изучении различных материалов

4. Особенности исследования кристаллических и аморфных материалов методами колебательной спектроскопии.
5. Исследования полимерных материалов методами колебательной спектроскопии.

Для успешного усвоения лекционного курса проводятся семинарские занятия, на которых обсуждаются наиболее важные аспекты прочитанного лекционного материала. К каждому разделу существуют наборы вопросов и задач, над которыми аспирант работает самостоятельно, консультируется с преподавателем и представляет ему результаты.. Практические занятия посвящены освоению методик подготовки образцов для регистрации спектров, освоению экспериментальных методов регистрации ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния, интерпретации полученных спектров).

1. Обучение работе на спектрометрах IFS EQUINOX 55 VERTEX 70v (BRUKER).
2. Обучение работе на Raman спектрофотометре TriVista 777.

#### 4. Система контроля знаний аспиранта

**Текущий контроль** осуществляется последовательным суммированием результатов двух контрольных работ, каждая из которых оценивается в 50 баллов. Аспиранты, набравшие более 80 баллов, получают оценку отлично и освобождаются от сдачи экзамена.

**Итоговый контроль:** для контроля усвоения дисциплины предусмотрен экзамен, проводимый в письменной форме и оцениваемый в 100 баллов.

#### 5. Содержание дисциплины

**5.1. Новизна курса.** Помимо фундаментальных представлений колебательной спектроскопии в курс включена информация о самых современных достижениях в исследовании материалов различного назначения. Содержание курса аналогично материалу, читаемому в ведущих зарубежных университетах.

#### 5.2. Тематический план курса (распределение часов)

N	Наименование разделов	Количество часов			Всего
		Лекции	Практика	Самостоятельная работа	
1	Предмет и задачи колебательной спектроскопии	2			2
2	Природа молекулярных спектров, особенности ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния, информации	2			2
3	Информации, которую можно извлечь из анализа ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния при изучении различных материалов	2	2		4
4	Особенности исследования кристаллических и аморфных материалов методами колебательной спектроскопии.	2			2
5	Исследования полимерных материалов методами	2			2

	колебательной спектроскопии.				
6	Обучение работе на спектрометре IFS EQUINOX 55S (BRUKER).	2	2	8	12
7	Обучение работе на спектрометре VERTEX 70v (BRUKER)	4	6	8	18
8	Обучение работе на Raman спектрометре TriVista 777	2	4	12	18
9	Практическое занятие по интерпретации спектров		4	8	12
	Всего:	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>72</b>

### 5.3. Содержание разделов

#### **Предмет и задачи колебательной спектроскопии**

Исторический экскурс, основные вехи развития колебательной спектроскопии; выдающиеся ученые в области колебательной спектроскопии. Приборы для регистрации колебательных спектров, использование колебательных спектров для идентификации вещества, контроля за процессами, исследования строения вещества.

#### **Природа молекулярных спектров, особенности ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния**

Оптическая спектроскопия. Инфракрасная спектроскопия (ИК) и спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Колебания многоатомных молекул. Правила отбора.

#### **Информация, которую можно извлечь из анализа ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния при изучении различных материалов**

Способы интерпретации колебательных спектров, области расположения полос, характеристические колебания, низкочастотная область ИК спектра, низкочастотная область спектра комбинационного рассеяния.

#### **Особенности исследования кристаллических и аморфных материалов методами колебательной спектроскопии**

Исследование кристаллических комплексных фторидов и оксифторидов методами ИК спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Исследования стекол методами ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Область ближнего и среднего порядка, анализ процессов, происходящих при кристаллизации стекол, изменении состава систем.

#### **Исследования полимерных материалов методами колебательной спектроскопии**

Особенности исследования полимерных материалов, исследования фторполимеров, политетрафторэтилен, низкомолекулярные фторполимеры, использование теоретических расчетов для интерпретации колебательных спектров фторполимеров.

## ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Беллами Новые данные по ИК спектрам сложных молекул. Изд. “Мир”, М.: -1971.
2. К. Накамото, ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений, Изд. “Мир”, М. : , - 1991.
3. Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер, Определение строения органических соединений, Изд. “Мир”:, “БИНОМ лаборатория знаний”, М.: - 2006.
4. Дехант И., Данц Р., Киммер В., Шмольке Р. Инфракрасная спектроскопия полимеров. М.: Химия. – 1976. - 472 с.

Программу разработала  
д.х.н.

Л.Н. Игнатьева