

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

*Факультет физико-математических и естественных наук*

Рекомендовано МССН  
по направлению 04.00.00 «Химия»

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины**

**ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОННОЙ И КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

**Рекомендуется для направления подготовки**

**04.03.01 «ХИМИЯ»**

**1. Цели и задачи дисциплины:** Цель дисциплины «Основы электронной и колебательной спектроскопии» – обучение студентов применению методов оптической абсорбционной (УФ/вид и ИК) спектроскопии в исследовательских целях. УФ/вид и ИК абсорбционная спектроскопия – наиболее широко применяемые на практике спектральные методы, владение которыми необходимо любому химику. В курсе рассматриваются закономерности, описывающие взаимодействие электромагнитного излучения с веществом в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазонах, области применения этих методов, основные подходы для идентификации и характеристики соединений, принцип действия спектрофотометров.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП ВО:

Дисциплина «Основы электронной и колебательной спектроскопии» относится к вариативной части блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

### Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины (группы дисциплин)
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>			
1	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия Химическая технология Основы квантовой химии Введение в химию координационных соединений Физико-химические методы исследований неорганических веществ	Экспериментальные методы исследования в химии Методы получения новых веществ и материалов Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Учебная практика Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
2	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Информатика Основы квантовой химии Компьютерные технологии в химии	Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
<b>Профессиональные компетенции (вид профессиональной деятельности – научно-исследовательская)</b>			
3	ПК-1 Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия Химическая технология Основы квантовой химии Химия лекарственных веществ Основы нанохимии Введение в химию координационных соединений Физико-химические методы исследований неорганических веществ Стратегия органического синтеза	Экспериментальные методы исследования в химии Избранные главы химии Методы получения новых веществ и материалов Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

		Основы нефтехимии	
4	ПК-4 Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия	Экспериментальные методы исследования в химии Методы получения новых веществ и материалов Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

ОПК-1, ОПК-3, ПК-1, ПК-4

Таблица 2

#### Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Индикаторы достижения компетенций
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	<b>ИОПК-1.1.</b> Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов; <b>ИОПК-1.2.</b> Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	<b>ИОПК-3.1.</b> Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<b>ИПК-1.1.</b> Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования; <b>ИПК-1.2.</b> Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности; <b>ИПК-1.3.</b> Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин.
ПК-4	Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	<b>ИПК-4.2.</b> Владеет навыками использования современных методов и аппаратуры для изучения химических процессов, строения и свойств химических соединений.

В результате изучения дисциплины студент должен:

#### Знать:

- основные положения теории молекулярных абсорбционных спектров в оптической области и их связи с молекулярной структурой исследуемых объектов (компетенции ОПК-1, ОПК-3, ПК-1)

- основы применения абсорбционной спектроскопии в неорганической, координационной и органической химии (компетенции **ОПК-1, ОПК-3, ПК-4**);
- устройство и принцип работы спектрофотометров (компетенция **ПК-1**).

**Уметь:**

- интерпретировать молекулярные спектры поглощения в инфракрасной, видимой и ультрафиолетовой областях (компетенции **ОПК-1, ОПК-3, ПК-1**);
- пользоваться справочными данными и базами данных, включая базы данных в сети Интернет, для анализа и интерпретации спектральных данных. (компетенции **ОПК-1, ОПК-3**).

**Владеть:**

- практическими навыками подготовки образцов для регистрации спектра (компетенция **ПК-1**);
- методами обработки и анализа спектров с целью получения информации о структуре и составе вещества (компетенции **ОПК-1, ОПК-3, ПК-4**).

**4. Объем дисциплины и виды учебной работы**

Общая трудоемкость дисциплины составляет **2** зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр
		7
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	<b>36</b>	36
В том числе:		
Лабораторные работы (ЛР)	34	34
Промежуточная аттестация	2	2
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	<b>36</b>	36
<b>Общая трудоемкость</b> час	<b>72</b>	72
зач. ед.	<b>2</b>	2

**5. Содержание дисциплины**

**5.1. Содержание разделов дисциплины**

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	<b>Введение в спектроскопию</b>	Электромагнитный спектр. Сущность взаимодействия излучения с веществом. Симметрия молекул: элементы и правила симметрии, точечные группы симметрии, приводимые и неприводимые представления.
2.	<b>Электронная спектроскопия</b>	Природа электронных спектров. Спектры поглощения и спектры люминесценции. Условия возникновения спектра. Правила отбора. ЭСП органических соединений. Теория кристаллического поля. Закономерности расщепления АО в кристаллических полях разной симметрии и силы. Диаграммы Орбиталя Полосы переноса заряда. Идентификация веществ. Установление связей между строением веществ и параметрами ЭСП. Определение

		<p>констант кислотно-основного равновесия, состава и устойчивости комплексных соединений. Изучение кинетики химических реакций.</p> <p>Спектрофотометры и их принцип действия. Подготовка образцов и запись спектров. Обработка экспериментальных спектров.</p>
3.	<b>Колебательная спектроскопия</b>	<p>Колебания многоатомных молекул. Условия появления колебательных спектров поглощения. Правила отбора. Нормальные колебания. Классификация колебательных полос в ИК спектрах. Физический смысл колебательных параметров; характеристичность; связь симметрии с параметрами спектров. Изотопозамещение.</p> <p>Идентификация веществ. Установление строения молекул.. Изучение скоростей реакций и равновесий.</p> <p>Современные спектрофотометры, их принципиальное устройство. Растворители и вещества, используемые в ИК спектроскопии. Методы приготовления образцов. Расшифровка спектров.</p>

## 5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семина	СРС	Всего час.
1.	Введение в спектроскопию			8		10	18
2.	Электронная спектроскопия			12		10	22
3.	Колебательная спектроскопия			14		10	24
	Промежуточная аттестация			2		6	8

## 6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудо-емкость (час.)
1	1	Введение в молекулярную спектроскопию. Взаимодействие вещества с ЭМИ. Возникновение спектров.	2
2	1	Симметрия молекул.	2
3	1	Точечные группы. Приводимые представления. Разложение приводимых представлений.	2
4	1	<b>Контрольная работа:</b> Определение точечных групп молекул.	2
5	2	Спектрофотометры и их принцип действия. Подготовка образцов и запись спектров.	2
6	2	Обработка ЭСП.	2
7	2	Электронное строение молекул. Отнесение полос в ЭСП формальдегида	2
8	2	Атомные термы. Расщепление термов в поле лигандов. Отнесение d-d переходов в ЭСП.	2
9	2	Применение ЭСП. Анализ смесей. Исследование равновесий. Исследование кинетики реакций. Определение соотношения реагирующих веществ. Методы изомольных серий, молярных отношений, изобестической точки.	2
10	2	<b>Тест:</b> Электронная спектроскопия.	2
11	3	Знакомство с ИК спектрометрами. Методики приготовления образцов. Обработка ИК спектров	3
12	3	Классификация колебаний. Расчет числа и симметрии нормальных колебаний.	3
13	3	<b>Контрольная работа:</b> Расчет числа полос в колебательных спектрах.	2
14	3	Определение строения органических соединений по ИК спектрам	2
15	3	Определение строения координационных соединений по ИК спектрам	2
16	3	<b>Тест:</b> ИК спектроскопия.	2
17	1-3	<b>Зачет</b>	2

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

1. Лекционная аудитория с мультимедийным проектором.
2. Лаборатория для проведения научно-исследовательских работ со спектрофотометром CARY 50.
3. Лаборатория для проведения научно-исследовательских работ с Фурье-спектрометром Nicolet 670.
4. Компьютеры для проведения вычислений, обработки результатов и доступа к информационным системам.

## 9. Информационное обеспечение дисциплины

НАЗВАНИЕ РЕСУРСА	ОПИСАНИЕ РЕСУРСА	АДРЕС ДОСТУПА
eLIBRARY	Крупнейшая в России электронная библиотека научных публикаций, обладающая богатыми возможностями поиска и получения информации.	<a href="http://elibrary.ru">http://elibrary.ru</a>
en.edu.ru	Портал является составной частью федерального портала "Российское образование". Содержит ресурсы и ссылки на ресурсы по естественно-научным дисциплинам (физика, химия и биология)	<a href="http://www.en.edu.ru/">http://www.en.edu.ru/</a>
ChemNet	Химическая информационная сеть. Информация о химических факультетах, вузах, ассоциациях. Электронная библиотека. Базы данных по химии..	<a href="http://www.chem.msu.su/">http://www.chem.msu.su/</a>
Chemport.ru -	Химический портал. Новости химии, работа для химиков, форум и др. материалы.	<a href="http://www.chemport.ru">http://www.chemport.ru</a>
elementy.ru	Портал о фундаментальной науке	<a href="http://www.elementy.ru">http://www.elementy.ru</a> .
NIST Chemistry WebBook	База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений.	<a href="http://webbook.nist.gov/chemistry/">http://webbook.nist.gov/chemistry/</a>
XuMuk.ru	сайт о химии для химиков. Химическая энциклопедия, фармацевтические справочники, методики синтеза и другие полезные материалы он-лайн	<a href="http://www.xumuk.ru/">http://www.xumuk.ru/</a>
ChemInfo	Каталог химических информационных ресурсов (англ.) Сайт создан для того, чтобы помочь в поиске химической информации в Интернете (Indiana University) From this webpage you will be able to try many applications using the open source project Visualizer	<a href="http://www.cheminfo.org">www.cheminfo.org</a> .
Spectroscopy Now	Сайт для химиков-спектроскопистов. Содержит обширные базы данных спектров, программы идентификации соединений и много других интересных ресурсов (англ.).	<a href="http://www.spectroscopynow.com">http://www.spectroscopynow.com</a>
AIST Spectral Database for Organic Compounds SDBS	База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония.	<a href="http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi">http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi</a>

## 10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

### а) основная литература

1. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1. М.: Мир, 1981.
2. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков, Физические методы исследования в химии, - М., Мир, 2003. ; М.: Мир, 2006.

### б) дополнительная литература

1. Пентин Ю.А, Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии: учеб. пособие М.: Мир: БИНОМ. Лаб. Знаний, 2008
2. Зайцев Б.Е., Ковальчукова О.В., Страшнова С.Б. Применение ИК-спектроскопии в химии. М., РУДН, 2008, 150 с.  
<http://lib.rudn.ru/MegaPro2/Download/MObject/1574/Zaicev%20B.E.pdf>

3. Булатов М.И., Калинин И.П. Практическое руководство по фотоколориметрии и спектрофотометрическим методам анализа. Л, Химия, 1972, 407 с.

**11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**  
<http://esystem.pfur.ru/course/view.php?id=5139>

## Определение точечной группы молекулы

<http://symmetry.otterbein.edu/index.html>

## Получение полного представления

**Представление группы** - наборы матриц, которые показывают, как при операциях группы преобразуются функции (или их совокупность)

Его можно представить в виде *характеров (суммы диагональных элементов)*

## Получение полных представлений

Вектор (или часть базиса) не меняется при операции симметрии – характер представления +1.

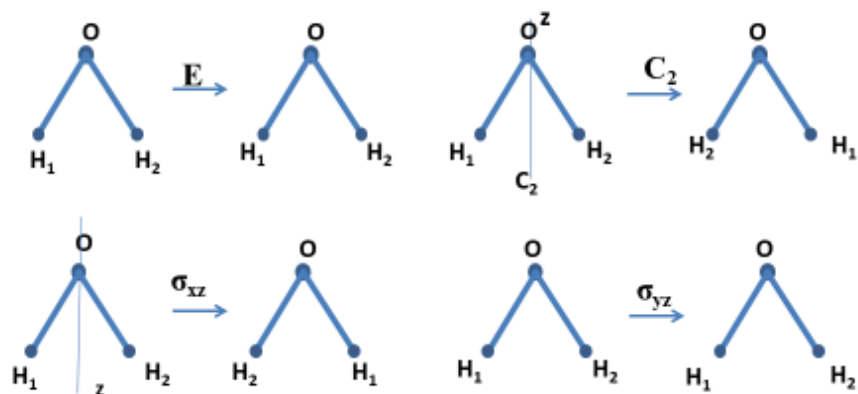
Вектор (или часть базиса) меняет направление при операции симметрии – характер представления -1.

Вектор (или часть базиса) меняет положение при операции симметрии – характер представления 0.

В качестве **базиса** можно использовать атомы (точки), координаты атомов (точек), векторы, связи, волновые функции (АО, МО).

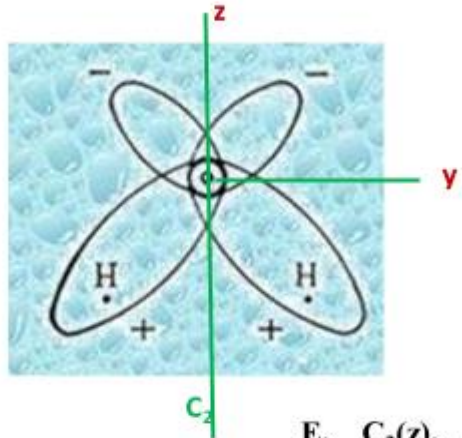


Пример: молекула  $\text{H}_2\text{O}$ , точечная группа  $C_{2v}$ .  
 а) базис – атомы (точки)



	E	$C_2(z)$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
	3	1	1	3

б) базис – 2  $\sigma$ -МО



	E	$C_2(z)$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$\chi$ 2 $\sigma(\text{OH})$	2	0	0	2

## Разложение приводимого представления на неприводимые

**Приводимые представления** можно разложить на неприводимые представления. Неприводимые представления различных точечных групп суммированы в виде **таблиц характеров** для точечных групп.

Таблицы характеров можно найти здесь:

<https://ru.webqc.org/symmetrypointgroup-d4h.html>

### Разложение полного (приводимого) представления на неприводимые представления

*Характер приводимого представления равен сумме характеров неприводимых представлений.*

Любое представление группы можно разложить на неприводимые представления этой группы.

$$n_i = 1/h \sum g \chi_i(\mathbf{R}) \chi_i(\mathbf{R})$$

$n_i$  – размер вклада  $i$ -го неприводимого представления (целое число или 0)

$\mathbf{R}$  – операция симметрии;

$h$  – порядок группы (общее число операций симметрии в точечной группе);

$g$  – число элементов в классе (например, 3  $C_2$ ;  $\rightarrow g = 3$ );

$\chi_i(\mathbf{R})$  – характер неприводимого представления операции  $\mathbf{R}$ ;

$\chi_i(\mathbf{R})$  – характер аналогичной операции ( $\mathbf{R}$ ) в приводимом представлении

*Пример: Молекула  $\text{H}_2\text{O}$ , точечная группа  $C_{2v}$ .  
базис – 2  $\sigma$ -МО*

	E,	$C_2(z)$ ,	$\sigma_{xz}$ ,	$\sigma_{yz}$
полное представление	2	0	0	2
неприводимое представление $A_1$	1	1	1	1
$n(A_1) = 1/4 (2 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 2 \cdot 1) = 1$				

	E,	$C_2(z)$ ,	$\sigma_{xz}$ ,	$\sigma_{yz}$
полное представление	2	0	0	2
неприводимое представление $A_2$	1	1	-1	-1
$n(A_2) = 1/4 (2 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) + 2 \cdot (-1)) = 0$				

$$\Gamma = A_1 + B_2$$

## Обработка электронных спектров поглощения

Образец \_\_\_\_\_, растворитель \_\_\_\_\_, концентрация  $C_K = 2,00 \cdot 10^{-3}$  моль/л  
 Прибор \_\_\_\_\_, диапазон длин волн, толщина кюветы  $l = 0,10$  см

№ п.п	$\lambda_{\text{макс}} \pm$ , нм	$\tilde{\nu}_{\text{макс}} \pm$ , см <sup>-1</sup>	$A \pm$	$\varepsilon \pm$ , моль <sup>-1</sup> л см <sup>-1</sup>
1	$250 \pm 1$		$1,25 \pm 0,01$	$(6,2 \pm 0,7) \cdot 10^3$
2				

$$\varepsilon = \frac{A}{C \cdot l} = \frac{1,25}{2,00 \cdot 10^{-3} \cdot 0,10} = 6250 = 6,2 \cdot 10^3 \text{ моль}^{-1} \cdot \text{л} \cdot \text{см}^{-1}$$

Рассчитываем относительные погрешности определения оптической плотности, концентрации и толщины кюветы

$$E_r(A) = \frac{E_a(A)}{A} = \frac{0,01}{1,25} = 0,008 \quad E_r(C) = \frac{E_a(C)}{C} = \frac{0,01 \cdot 10^{-3}}{2,00 \cdot 10^{-3}} = 0,005$$

$$E_r(l) = \frac{E_a(l)}{l} = \frac{0,01}{0,10} = 0,1$$

Рассчитываем относительную погрешность определения молярного коэффициента поглощения

$$E_r(\varepsilon) = E_r(A) + E_r(C) + E_r(l) = 0,008 + 0,005 + 0,1 = 0,11$$

Рассчитываем абсолютную погрешность определения молярного коэффициента поглощения

$$E_a(\varepsilon) = \varepsilon E_r(\varepsilon) = 6,2 \cdot 10^3 \cdot 0,11 = 0,68 \cdot 10^3 \quad \varepsilon = (6,2 \pm 0,7) \cdot 10^3 \text{ моль}^{-1} \cdot \text{л} \cdot \text{см}^{-1}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{250 \cdot 10^{-7}} = 40000 = 4,00 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$$

$$E_a(\lambda) = 1 \text{ нм} \quad \begin{aligned} \lambda_{\text{макс}} &= 250 + 1 = 251 \text{ нм} \\ \lambda_{\text{мин}} &= 250 - 1 = 249 \text{ нм} \end{aligned}$$

$$\tilde{\nu}_{\text{мин}} = \frac{1}{\lambda_{\text{макс}}} = \frac{1}{251 \cdot 10^{-7}} = 3,98 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}_{\text{макс}} = \frac{1}{\lambda_{\text{мин}}} = \frac{1}{249 \cdot 10^{-7}} = 4,02 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$$

$$\tilde{\nu} = (4,00 \pm 0,02) \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$$

## Определение термина основного состояния атома (иона)

1. макс. мультиплетность по спину ( $S$ )
2. макс. орбитальный момент  $L$

$d^2$  Терм основного состояния

$$S = M_{Smax} = 1 \quad 2S+1=3 \quad M_S = 1, 0, -1$$

$$L = M_{Lmax} = 3 \quad \text{F-терм} \quad M_L = 3, 2, \dots, -2, -3$$

${}^3F$

$M_L$	2	1	0	-1	-2
	↑				↑

$$M_L = 0 \quad M_S = 1 \quad +$$

	↑↓				
--	----	--	--	--	--

$$M_L = 4 \quad M_S = 0 \quad -$$

		↑↓			
--	--	----	--	--	--

$$M_L = 0 \quad M_S = 0 \quad -$$

За счет спаривания электронов энергия состояния увеличивается

## Определение типов симметрии орбиталей в поле лигандов

1. Определение характеров представлений орбиталей в данной точечной группе (полного представления)

$$\chi(E) = 2l + 1 \quad \chi(C_n) = \frac{\sin(l + \frac{1}{2})\varphi}{\sin \varphi/2} \quad \varphi = \frac{2\pi}{n}$$

$$\chi(i) = 2l + 1 \quad (l\text{-четное}) \quad l\text{-орбитальное квантовое число}$$

$$\chi(i) = -(2l + 1) \quad (l\text{-нечетное})$$

E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2=(C_4)^2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
						$C_4i$	$C_3i$	$C_2'i$	$C_2i$

2. Разложение полного представления на неприводимые представления.

## Определение состава комплекса

### Метод изомолярных серий

$C_L = 0$                        $x_{\max}$                        $C_M = 0$

**Условия**                       $C_L + C_M = \text{const}$      $C_L : C_M - \text{var}$

Образование одного комплекса     $nM + mL \leftrightarrow M_nL_m$

1. Готовится серия растворов с соотношением  $x = C_L / (C_L + C_M)$  от 0 до 1
2. Измеряется A растворов на  $\lambda_{\text{анал}}$   
 $\lambda_{\text{анал}}$  – максимум полосы поглощения комплекса
3. Строится график A от x  
По графику определяется  $x_{\text{макс}}$
4. Определяется соотношения реагирующих веществ  
 $C_L / C_M = x_{\text{макс}} / (1 - x_{\text{макс}}) = m/n$      $x_{\text{макс}} = m / (n+m)$

ML	n = 1	m = 1	x <sub>макс</sub> = 1/2 = 0,5	ML <sub>3</sub>	n = 1	m = 3	x <sub>макс</sub> = 3/4 = 0,75
ML <sub>2</sub>	n = 1	m = 2	x <sub>макс</sub> = 2/3 = 0,67	M <sub>2</sub> L	n = 2	m = 1	x <sub>макс</sub> = 1/3 = 0,33

### Метод изомолярных серий

$C_L = 0$                        $x_{\max}$                        $C_M = 0$

**Условия**                       $C_L + C_M = \text{const}$      $C_L : C_M - \text{var}$

Образование одного комплекса     $nM + mL \leftrightarrow M_nL_m$

1. Готовится серия растворов с соотношением  $x = C_L / (C_L + C_M)$  от 0 до 1
2. Измеряется A растворов на  $\lambda_{\text{анал}}$   
 $\lambda_{\text{анал}}$  – максимум полосы поглощения комплекса
3. Строится график A от x  
По графику определяется  $x_{\text{макс}}$
4. Определяется соотношения реагирующих веществ  
 $C_L / C_M = x_{\text{макс}} / (1 - x_{\text{макс}}) = m/n$      $x_{\text{макс}} = m / (n+m)$

ML	n = 1	m = 1	x <sub>макс</sub> = 1/2 = 0,5	ML <sub>3</sub>	n = 1	m = 3	x <sub>макс</sub> = 3/4 = 0,75
ML <sub>2</sub>	n = 1	m = 2	x <sub>макс</sub> = 2/3 = 0,67	M <sub>2</sub> L	n = 2	m = 1	x <sub>макс</sub> = 1/3 = 0,33

## Определение типов симметрии колебаний

1. Определить характеры представлений колебаний в данной точечной группе (полного представления)

### II По формулам

$$\chi(E) = 3N - 6$$

$$\chi(C_n^k) = (N_C - 2) \left( 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} k \right)$$

$$\chi(S_n^k) = N_S \left( -1 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} k \right)$$

$$\chi(\sigma) = N_\sigma$$

$$\chi(i) = -3N_i$$

где  $N$  - общее число атомов,  $N_C, N_S, N_\sigma, N_i$  - число атомов, не меняющих своего положения при операциях  $C_n^k, S_n^k, \sigma, i$

2. Разложить полное (приводимое) представление на неприводимые
3. Определить колебания, активные в ИК спектре.

**Колебание активно в ИК спектре**, если оно относится к тому же типу симметрии, к которому принадлежит одна из компонент дипольного момента (вектора трансляции).



### Плоский ион XY<sub>3</sub>

	D <sub>3h</sub>	E	2C <sub>3</sub>	3C <sub>2</sub> '	σ <sub>h</sub>	2S <sub>3</sub>	3σ <sub>v</sub>	linear, rotatins
$\chi(E) = 3N - 6$	A <sub>1</sub> '	1	1	1	1	1	1	
$\chi(C_3) = (N_C - 2) \left( 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{3} \right)$	A <sub>2</sub> '	1	1	-1	1	1	-1	R <sub>z</sub>
$\chi(C_2) = (N_C - 2) \left( 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{2} \right)$	E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y)
$\chi(\sigma) = N\sigma$	A <sub>1</sub> ''	1	1	1	-1	-1	-1	
$\chi(S_3) = N_S \left( -1 + 2 \cos \frac{2\pi}{3} \right)$	A <sub>2</sub> ''	1	1	-1	-1	-1	1	z
	E''	2	-1	0	-2	1	0	(R <sub>x</sub> , R <sub>y</sub> )
		6	0	0	4	-2	2	
		6	0	0	4	-4	6	

**Γ = A<sub>1</sub>' + A<sub>2</sub>'' + 2 E'**    6 колебаний

В ИК активны **A<sub>2</sub>'' + 2 E'**  
5 колебаний,    3 полосы

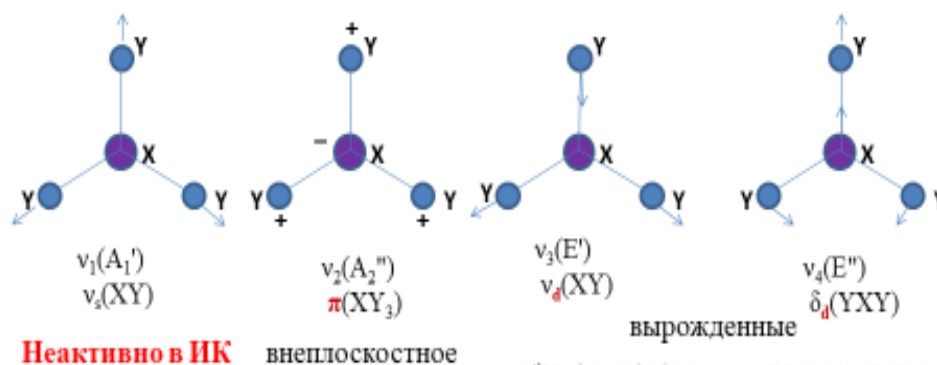
### Обработка ИК спектров

№ П/П	ν <sub>макс</sub> +-, см <sup>-1</sup>	Интенсивность*	отнесение	
			По симметрии	По форме
1				
2				

Для определения формы колебаний используйте Приложение III в книге Драго, том 2, стр.423-427.

## Отнесение колебаний

### Плоский ион $XY_3$



Таблицы характеристических частот в инфракрасной спектроскопии см. Драго, т.1. с. 219-224

### Качественный анализ: расшифровка структуры

Отсутствие полосы в некоторой области частот – надежное доказательство того, что соответствующая группа в молекуле отсутствует.

Наличие полосы еще не свидетельствует, что в молекуле имеется данная группа

Для рассматриваемой группы следует найти все ее характеристические полосы.

Не все полосы ИК спектра одинаково информативны. Необходимо в первую очередь исследовать полосы в тех областях спектра, где их мало.

---

## **12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Основы электронной и колебательной спектроскопии» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме в соответствии с требованиями «Регламента формирования фондов оценочных средств (ФОС)», утвержденного приказом ректора от 05.05.2016 г. № 420 и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Знания студентов оцениваются по рейтинговой системе. Оценка знаний по рейтинговой системе основана на идее поощрения систематической работы студента в течение всего периода обучения.

При выставлении оценок используется балльно-рейтинговая система, в соответствии с Положением о БРС оценки качества освоения основных образовательных программ, принятого Решением Ученого совета университета (протокол №6 от 17.06.2013 г) и утвержденного Приказом Ректора Университета от 20.06.2013 года.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

### **Разработчики:**

Доцент кафедры неорганической химии,  
к.х.н., доцент

О.В. Рудницкая

**Заведующий кафедрой**  
неорганической химии, д.х.н.

В.Н. Хрусталев