

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка

Затверджено
Вченою радою фізичного факультету
«___»_____200__р.

Протокол №____
Голова вченої ради, декан

Проф. Макарець М.В.

Фізичний факультет
Кафедра молекулярної фізики

Кандидат фізико-математичних наук,
Григор'єв Андрій Миколайович

Викладачі, що ведуть лабораторні заняття:
Григор'єв Андрій Миколайович

МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ВЗАЄМОДІЯ

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ

для студентів 5-го курсу фізичного факультету
групи спеціалізації „Медична фізика” та „Молекулярна фізика”
спеціальності 8.070100

Затверджено
кафедрою молекулярної фізики
«___»_____201__р.

Протокол №____
Завідувач кафедри

Проф. Булавін Л.А.

Вступ

Дисципліна «Міжмолекулярна взаємодія» для магістрів фізичного факультету є вибірковою дисципліною за вибором вищого навчального закладу для спеціалізацій «молекулярна фізика» та «медична фізика», що читається у 1 семестрі в обсязі 3 кредитів (108 годин), в тому числі 51 годин аудиторних занять, з них 34 години лекцій і 17 годин лабораторних робіт і 57 годин самостійної роботи. Закінчується іспитом у 1 семестрі.

Метою і завданням навчальної дисципліни «Міжмолекулярна взаємодія» є отримання базових знань з теоретичних та експериментальних методів дослідження міжмолекулярної взаємодії.

Предмет навчальної дисципліни «Міжмолекулярна взаємодія» включає класичні та квантові підходи до пояснення міжмолекулярної взаємодії, спектральні методи дослідження міжмолекулярної взаємодії (мікрохвильова, інфрачервона спектроскопія, обертально-хвильова спектроскопія комбінаційного розсіяння, ЯМР-спектроскопія), теплофізичні методи дослідження міжмолекулярної взаємодії.

Вимоги до знань та вмінь.

Студент повинен знати:

1. Класичну теорію орієнтаційної та індукційної складових ван-дер-ваальсової взаємодії.
2. Квантову теорію дисперсійної складової ван-дер-ваальсової взаємодії.
3. Методи отримання інформації про міжмолекулярну взаємодію зі спектроскопічного експерименту.
4. Методи отримання інформації про міжмолекулярну взаємодію з теплофізичного експерименту.

Студент повинен вміти:

1. Логічно і послідовно формулювати класичну теорію орієнтаційної та індукційної складових ван-дер-ваальсової взаємодії.
2. Логічно і послідовно формулювати квантову теорію дисперсійної складової ван-дер-ваальсової взаємодії.
3. Аналізувати дані мікрохвильового, інфрачервоного та КР та ЯМР спектрів газів та рідин з метою отримання інформації про міжмолекулярну взаємодію (на прикладі простих систем).
4. Аналізувати дані по другому віріальному коефіцієнту, коефіцієнту зсувної в'язкості газів та модулю стисливості твердих тіл з метою отримання інформації про міжмолекулярну взаємодію.

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності.

Нормативно-навчальна дисципліна «Міжмолекулярна взаємодія» є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня магістр за спеціалізаціями молекулярна фізика та медична фізика. Вона спирається на знання, отримані студентом, в рамках базових курсів з молекулярної фізики, статистичної фізики та термодинаміки, оптики, атомної фізики, квантової механіки, термодинаміки та статистичної фізики. У свою чергу, цей предмет є підґрунтям для вивчення таких дисциплін як „Основи квантової біохімії”, „Фізика аеродисперсних систем”, „Релаксаційні явища в конденсованих середовищах”, „Радіаційна фізика рідинних та біологічних систем”, а також є основою для виконання магістерських робіт за тематикою кафедри молекулярної фізики.

Система контролю знань та умови складання іспиту.

Навчальна дисципліна «Міжмолекулярна взаємодія» оцінюється за модульно-рейтинговою системою. Вона складається з 2 модулів. Результати навчальної діяльності студентів оцінюється за 100-бальною шкалою.

Форми поточного контролю: оцінювання результатів виконання та захисту лабораторних робіт та домашніх самостійних завдань. Максимальна кількість балів, яку студент може отримати за виконання лабораторних робіт і домашніх завдань в одному модулі, дорівнює **10 балам**. Наприкінці кожного змістовного модулю проводиться контроль знань у вигляді **модульної письмової контрольної роботи**. Максимальна кількість балів, яку студент може отримати за модульну контрольну роботу, дорівнює **10 балам**.

Підсумковий модульний контроль знань студента проводиться у формі іспиту, під час якого може бути отримана максимальна кількість балів – **60 балів**.

Підсумкова семестрова рейтингова оцінка складається з семестрової модульної та екзаменаційної оцінок і дорівнює **100 балам**.

Підсумкова оцінка з дисципліни у балах 100-бальної шкали переводиться у **п'ятибальну** (національну шкалу):

За 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	Відмінно
75 – 89	Добре
60 – 74	Задовільно
35 – 59	Незадовільно
1 – 34	

При цьому, кількість балів відповідає оцінці:

1 – 34 – „незадовільно” з обов’язковим повторним вивченням дисципліни;

35 – 59 – „незадовільно” з можливістю повторного складання;

60 – 74 – „задовільно”;

75 – 89 – „добре”;

90 – 100 – „відмінно”.

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

№ лекції	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари/ лаборант., практичні	самост. робота	інші форми контр.
Змістовий модуль 1					
1	Вступ. Огляд теоретичних та експериментальних методів вивчення міжмолекулярної взаємодії.	2	2	3	
2	Класична теорія міжмолекулярної взаємодії. Мультиполь-мультипольна взаємодія.	2		3	
3	Класична електростатична теорія ван-дер-ваальсівської взаємодії.	2	2	4	
4	Квантова теорія взаємодії молекул з електромагнітним полем.	2		3	
5	Наближення Борна-Оппенгеймера. Теорема Гельмана-Фейнмана	2	2	4	
6	Квантова теорія дисперсійної взаємодії	2		3	
7	Взаємодія на малих відстанях	2		4	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за виконання домашніх завдань					

Змістовий модуль 2					
8	Поглинання та випромінювання електромагнітного поля атомами та молекулами.	2	2	3	
9	Ширина та інтенсивність спектральних ліній. Вплив міжмолекулярної взаємодії на спектри.	2		3	
10	Методи оптичної спектроскопії. Мікрохвильова спектроскопія.	2	2	4	
11	Методи оптичної спектроскопії. Інфрачервона спектроскопія.	2		3	
12	Спектроскопія комбінаційного розсіяння світла.	2	2	3	
13	Спектроскопія електронних переходів в молекулах	2		3	
14	Експериментальна техніка оптичної спектроскопії.	2	2	4	
15	Спін-резонансна спектроскопія	2		3	
16	Месбауерівська спектроскопія	2	1	3	
17	Теплофізичні властивості як джерело інформації про міжмолекулярну взаємодію	2		4	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
	Оцінка за модульну контрольну роботу				
	Оцінка за виконання домашніх завдань				
ІСПИТ					
	Оцінка за іспит				
	ВСЬОГО	34	17	57	

Загальний обсяг 108 год., в тому числі:
лекції – 34 год.
лабораторні роботи – 17 год.
самостійна робота – 54 год.

ТЕМАТИЧНО – ЗМІСТОВНА ЧАСТИНА КУРСУ

Змістовий модуль 1

Лекція 1. Вступ. Огляд теоретичних та експериментальних методів вивчення міжмолекулярної взаємодії.

Предмет і задачі курсу з міжмолекулярної взаємодії. Сучасні уявлення про міжмолекулярні взаємодії. Поняття про потенціал міжмолекулярної взаємодії. Характеристика різних типів взаємодій. Деякі спектроскопічні та фізико-хімічні прояви міжмолекулярних взаємодій.

Лабораторна робота 1. Визначення коефіцієнта поляризованості та дипольного моменту з температурної залежності діелектричної проникності газів та рідин.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1].

Лекція 2. Класична теорія міжмолекулярної взаємодії. Мультиполь-мультипольна взаємодія.

Електричне поле системи зарядів на далекій відстані. Мультипольні моменти. Дипольний і квадрупольний моменти молекул. Взаємодія мультиполів.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3, 4].

Лекція 3. Класична електростатична теорія ван-дер-ваальсівської взаємодії.

Полярні молекули. Орієнтаційна складова Ван-дер-ваальсівської взаємодії. Поляризуємість молекул. Індукційна складова Ван-дер-ваальсівської взаємодії. Напівкласичні уявлення про дисперсійну складову Ван-дер-ваальсівської взаємодії.

Лабораторна робота 2. Визначення відносних внесків орієнтаційної, індукційної та дисперсійної складових Ван-дер-ваальсівської взаємодії полярних та неполярних молекул.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1,3, 4].

Лекція 4. Квантова теорія взаємодії молекул з електромагнітним полем.

Ефект Штарка. Статична і динамічна поляризуємість атомів і молекул. Квантова теорія дисперсії.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1,2,4].

Лекція 5. Наближення Борна-Оппенгеймера. Теорема Гельмана-Фейнмана.

Поділ на електронний і ядерний рух. Наближення Борна-Оппенгеймера. Поняття про потенціал міжмолекулярної взаємодії. Теорема Гельмана-Фейнмана.

Лабораторна робота 3. Визначення енергії взаємодії макроскопічних тіл.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [2].

Лекція 6. Квантова теорія дисперсійної взаємодії.

Енергія взаємодії двох атомів у другому порядку теорії збурення. Наближення одного електронного переходу. Формула Лондона. Формула Казимира-Польдера. Узагальнення на випадок несиметричних молекул. Фізична картина поляризаційних взаємодій. Ефект запізнення. Сили Казимира.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1 – 4].

Лекція 7. Взаємодія на малих відстанях.

Обмінна взаємодія. Резонансна взаємодія.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.

2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [2, 4].

Матеріал, що винесений на самостійне вивчення

1. Водневий зв'язок.
2. Донорно-акцепторна взаємодія.
3. Гідрофобна взаємодія.
4. Пондеромоторні сили. Тензор Максвелла.
5. Дисперсійна взаємодія між макроскопічними тілами.
6. Теорія збурень Релея-Шредінгера.
7. Теорія збурень Брілюена-Вігнера.
8. Золоте правило Фермі.

Контрольні запитання та завдання

1. Знайти потенціальну енергію взаємодії точкового заряду і точкового диполя.
2. Знайти усереднену потенціальну енергію взаємодії точкового заряду і точкового диполя
3. Знайти дипольний момент атому водню в станах $2s$ та $2p$.
4. Знайти квадрупольний момент атому водню в станах $3s$, $3p$ та $3d$.
5. Обчислити поляризуємість одновимірної системи двох зарядів, сполученої пружиною з коефіцієнтом пружності k .
6. Електрон знаходиться в прямокутній потенціальній ямі довжиною L . Знайти поляризуємість цієї системи паралельно довжині ями.
7. Обчислити поляризуємість атому водню в основному стані. Врахуйте лише переходи на $2p$ орбіталі.
8. Для етилену сила осцилятора переходу на 160 нм дорівнює 0.3. Оцініть середню поляризуємість молекули.
9. Оцінити дисперсійну складову енергії взаємодії двох атомів водню, які знаходяться в основному стані.
10. Електрони знаходяться в прямокутних потенціальних ямах довжиною L , відстань між центрами яких дорівнює R . Обчислити дисперсійну складову енергії взаємодії двох електронів.
11. Розрахувати в першому порядку теорії збурень енергію взаємодії двох молекул піридину, орієнтованих паралельно одна одній. Відстань $R=2$ нм. Дипольний момент $D=2.2$ Д.
12. Знайти залежність енергії взаємодії двох лінійних осциляторів, які коливаються вздовж лінії, що їх сполучає, на відстані R між ними. За модель осцилятора взяти електричний диполь.
13. Розрахувати дисперсійну складову енергію взаємодії двох однакових аліфатичних полімерних ланцюгів, розташованих паралельно, що складаються з N структурних одиниць. Структурні одиниці взаємодіють за законом $U = -c/r^6$, де c – стала. Відстань між ланцюгами вважати набагато меншою за довжину ланцюга.
14. Користуючись потенціалом Леонарда-Джонса $U = c_{12}/r^{12} - c_6/r^6$, показати, що потенціальну енергію взаємодії молекули з твердим адсорбентом можна виразити

рівнянням $U = \frac{\pi c_{12} n}{45x^9} - \frac{\pi c_6 n}{6x^3}$, де x – відстань від молекули до поверхні адсорбенту, n – кількість молекул в одиниці об'єму.

15. Користуючись потенціалом Леонарда-Джонса $U = c_{12}/r^{12} - c_6/r^6$, отримати залежність енергії притягання двох паралельних пластин від відстані h між ними.

Змістовий модуль 2

Лекція 8. Поглинання та випромінювання електромагнітного поля атомами та молекулами.

Класична модель випромінювання. Спектральний склад випромінювання. Лоренцова форма і ширина лінії випромінювання. Час випромінювання. Форма лінії поглинання. Квантова інтерпретація форми лінії випромінювання. Коефіцієнти Ейнштейна. Ймовірність переходу під дією збурення.

Лабораторна робота 4. Визначення відносної частки атомів у збудженому стані в залежності від інтенсивності пучка.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 5].

Лекція 9. Ширина та інтенсивність спектральних ліній. Вплив міжмолекулярної взаємодії на спектри.

Причини уширення. Однорідне та неоднорідне уширення. Допплерівське уширення. Ударне уширення. Кореляційна теорія форми ліній. Механізми уширення оптичних переходів в рідинах. Локальні диполь-дипольні взаємодії і неоднорідне уширення ліній.

Лабораторна робота 5. Визначення відносних внесків механізмів природного, доплерівського та ударного розширення в ширину спектральних ліній.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 5].

Лекція 9. Методи оптичної спектроскопії. Мікрохвильова спектроскопія.

Обертальний рух молекул. Наближення жорсткого ротатора. Обертальний спектр у випадку двохатомної, сферичної та аксіально-симетричної молекул. Відцентрове розтягнення. Наближення нежорсткого ротатора.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 5].

Лекція 10. Методи оптичної спектроскопії. Інфрачервона спектроскопія.

Колівальний рух молекул. Наближення гармонічного осцилятора. Потенціал Морзе. Наближення ангармонічного осцилятора. Колівальний спектр двохатомної молекули. Обертальна структура колівального спектру. Колівання багатоатомних

молекул. Ефекти ангармонічності. Основні частоти і обертони. Резонанс Фермі. Характеристичні частоти.

Лабораторна робота 5. Визначення довжини хімічного зв'язку двохатомних молекул за даними мікрохвильової та інфрачервоної спектроскопії.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 5].

Лекція 11. Спектроскопія комбінаційного розсіяння світла.

Класична та квантова інтерпретація КР світла. Обертальні та коливальні спектри КР. Правила відбору для резонансного та комбінаційного розсіяння. Поляризація та КР світла.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 5].

Лекція 12. Спектроскопія електронних переходів в молекулах.

Електронні спектри двохатомних молекул. Коливальна структура. Інтенсивність коливально-електронних спектрів. Принцип Франка-Кондона. Енергія дисоціації. Перевипромінення збудженої молекули. Флуоресценція. Фосфоресценція.

Лабораторна робота 6. Визначення структури молекули за даними спектрів поглинання та комбінаційного розсіяння світла.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 5].

Лекція 13. Експериментальна техніка оптичної спектроскопії.

Методи реєстрації спектрів. Принципові схеми спектрометрів: абсорбційні та емісійні спектрометри. Чутливість та роздільна здатність. Фур'є спектроскопія. Виділення спектру зі шуму. Експериментальна техніка мікрохвильової та інфрачервоної спектроскопії.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 5].

Лекція 14. Спін-резонансна спектроскопія.

Взаємодія спіну зі зовнішнім полем. Заселеність енергетичних рівнів. Ларморова прецесія. Повздовжня і поперечна релаксація. Фур'є-спектроскопія ядерного магнітного резонансу. Багатоімпульсна фур'є-спектроскопія ЯМР. Спін-спінова релаксація. Спін-граткова релаксація. Хімічний зсув. Пряма та непряма спін-спінова взаємодія. Стала взаємодії. Взаємодія між декількома ядрами.

Лабораторна робота 7. Визначення структури молекули за даними спектрів ЯМР.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.
Література [1, 5].

Лекція 15. Месбауерівська спектроскопія.

Принципи месбауерівської спектроскопії. Хімічний зсув. Квадрупольні ефекти. Дія магнітного поля.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 5].

Лекція 17. Теплофізичні властивості як джерело інформації про міжмолекулярну взаємодію.

Напівемпіричні модельні потенціали. Потенціал Леонарда-Джонса. Потенціал Штокмайєра. Другий віріальний коефіцієнт і коефіцієнт зсувної в'язкості газів як джерело інформації про парну взаємодію молекул. Визначення крутизни сил відштовхування за даними пружних сталих кристалів і рідин.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1].

Матеріал, що винесений на самостійне вивчення

1. Багатофотонні процеси.
2. Механізми релаксації збудження молекул в газах та рідинах.
3. Спектри електронних переходів в багатоатомних молекулах.
4. Спектроскопія електронного парамагнітного резонансу.
5. Рівняння Блоха. Еволюція дворівневої системи.
6. Апаратна функція. Некоректність задачі визначення спектру.
7. Ефект Керра.

Контрольні запитання та завдання

1. Які з молекул Br_2 , HBr та CS_2 активні в мікрохвильовій та інфрачервоній областях.
2. Різниця енергій збудженого та основного станів дорівнює $4,005 \cdot 10^{-22}$ Дж/молекула. Нехай в основному стані знаходиться 1000 молекул. Яка рівноважна заселеність збудженого стану при температурах 290 К і 2900 К?
3. Обертальний спектр $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ складається із серії еквідистантних ліній, розташованих на відстані $0,71433 \text{ см}^{-1}$ одна від одної. Обчисліть обертальну сталу B , момент інерції та довжину зв'язку молекули. Визначте хвильове число для переходу $J=9 \rightarrow J=10$ і встановіть, якому переходу відповідає найінтенсивніша лінія в спектрі при кімнатній температурі (300 К).
4. Три послідовні лінії обертального спектру H^{79}Br спостерігаються при 84,544, 101,355 і $118,112 \text{ см}^{-1}$. Визначте, яким переходам $J'' \rightarrow J'$ вони відповідають, потім обчисліть значення B і D та оцініть силу зв'язку та частоту коливань цієї молекули.
5. Центральні частоти смуг основного переходу і першого обертопу для молекули $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ дорівнюють відповідно $1876,06$ і $3724,20 \text{ см}^{-1}$. Знайти рівноважну коливальну частоту, сталу ангармонічності, значення нульової енергії і силову сталу молекули. Оцініть енергію дисоціації цієї молекули.
6. Коливальні хвильові числа молекул HCl , DCl , D_2 та HD для основного стану дорівнюють: 2885, 1990, 2990 і 3627 см^{-1} відповідно. Обчисліть зміну енергії в

кДж/моль в реакції $\text{HCl} + \text{D}_2 \rightarrow \text{DCl} + \text{HD}$ і визначте виділяється чи поглинається енергія.

- Рівноважна коливальна частота молекули йоду I_2 та її стала ангармонічності дорівнюють 215 cm^{-1} і $0,003$; яку частку складає інтенсивність „гарячої смуги” від інтенсивності основної смуги ($v=0 \rightarrow v=0$) при температурі 300 K ?
- ІЧ- та КР спектри молекули A_2B_2 мають такі характеристики:

ν, cm^{-1}	ІЧ	КР
3374	-	Сильна
3287	Дуже сильна; PR-контур	-
1973	-	Дуже сильна
729	Дуже сильна; PQR-контур	-
612	-	Слабка

Що можна сказати про структуру цієї молекули? Встановіть, наскільки це можливо, відповідність спостережених смуг типам нормальних коливань.

- ІЧ- та КР-спектри молекули AB_2 мають такі характеристики:

ν, cm^{-1}	ІЧ	КР
3756	Дуже сильна, \perp	-
3652	Сильна, \parallel	Сильна, поляризована
1595	Дуже сильна, \parallel	-

- Обертальна тонка структура ІЧ смуг складна і не описується простими PR- та PQR-контуррами. Що можна сказати про будову цієї молекули?
- У спектрі системи типу AX спостерігаються чотири лінії, які характеризуються величинами $\delta=5.8; 5.7; 1.1; 1.0$ (вимірених відносно ТМС на спектрометрі з робочою частотою 100 МГц). Які величини хімічних зсувів для ядер А і Х та сталі взаємодій між ними?
- Для вінілфториду відомі такі сталі взаємодій: $J(\text{H}'-\text{H}'') = 5 \text{ Гц}$, $J(\text{H}'-\text{H}''') = 13 \text{ Гц}$, $J(\text{H}''-\text{H}''') = -3 \text{ Гц}$, $J(\text{H}'-\text{F}) = 85 \text{ Гц}$, $J(\text{H}''-\text{F}) = 50 \text{ Гц}$, $J(\text{H}'''-\text{F}) = 20 \text{ Гц}$. Намалювати спектр ЯМР ядра фтору. Вважати, що різниці в величинах хімічних зсувів для усіх ядер водню порівняно зі сталими взаємодіями.
- Визначте кількість ліній ЕПР для таких радикалів: $[\text{CF}_2\text{H}]$, $[\text{CF}_2\text{H}]$, $[\text{CF}_2\text{B}]$, $[\text{CClH}_2]$.
- Момент фотону з довжиною хвилі λ дорівнює h/λ . Обчислити швидкість вільного мессбауерівського ядра масою $1.67 \cdot 10^{-25} \text{ кг}$ при довжині хвилі γ -кванту 0.1 нм . Яка величина доплерівського зсуву частоти γ -випромінювання відносно зовнішнього спостерігача?
- Деяке мессбауерівське ядро має значення спінів $5/2$ і $3/2$ у збудженому та основному стані відповідно. На скільки ліній розщепиться γ -резонансний спектр, якщо ядро знаходиться під дією градієнта внутрішнього електричного поля у відсутності магнітного поля?

Питання на іспит і структура білету

Білет складається з 2 теоретичних і одного практичного завдання (задачі). За кожне з теоретичних питань максимальна кількість балів, яку може отримати студент, дорівнює 15 балам. За практичне завдання – 20 балів. Додаткові питання – 10 балів.

Теоретичні питання до іспиту збігаються з назвою лекцій. Практичні – з контрольними питаннями і завданнями до I-го і II-го модулів.

Рекомендована література

1. Адаменко І.І., Булавін Л.А. Фізика рідин та рідинних систем. – К.: АСМІ, 2006. – 660 с.
2. Atkins P.W., Friedman R.S. Molecular Quantum Mechanics. 3ed., Oxford, 1996.
3. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982.
4. Литинский Г.Б. Теоретическая химия. Часть 2. Квантовая химия. – Харьков, 2005.
5. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. – М.: Мир, 1985.