

УДК 544
ББК 24.5
Л84

*Печатается по решению редакционно-издательского совета
Южного федерального университета (протокол № 4 от 5 мая 2016 г.)*

Рецензенты:

доктор химических наук, профессор кафедры «Химия» Ростовского
государственного университета путей сообщения **Булгаревич С. Б.**;
доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой химии
Южного федерального университета **Уфлянд И. Е.**

Луков, В. В.

Л84 Физические методы исследования в химии : учебное пособие /
В. В. Луков, И. Н. Щербаков ; Южный федеральный универси-
тет. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального уни-
верситета, 2016. – 216 с.

ISBN 978-5-9275-2023-7

Учебное пособие соответствует требованиям ФГОС ВО и программе учебной дисциплины «Физические методы исследования в химии». Детально изложены основные теоретические понятия и рассмотрены методики таких современных методов исследования, как ИК-, ЯМР-, ЭПР-, EXAFS- и электронная спектроскопия, а также метода дипольных моментов.

Предназначено для студентов, аспирантов и преподавателей химических факультетов университетов.

ISBN 978-5-9275-2023-7

УДК 544
ББК 24.5

© Южный федеральный университет, 2016
© Луков В. В., Щербаков И. Н., 2016
© Оформление. Макет. Издательство
Южного федерального университета, 2016

Оглавление

Введение	5
Общая характеристика физических методов исследования.....	7
Глава 1. Электрические методы исследования	16
1.1. Электрический дипольный момент молекулы.....	16
1.2. Экспериментальные методики и применение данных по электрическим дипольным моментам в химии.....	20
1.3. Расчетный аппарат метода дипольных моментов.....	24
Глава 2. Электронная спектроскопия.....	34
2.1. Метод электронной спектроскопии	34
2.2. Влияние растворителя на электронные спектры соединений	41
2.3. Электронные спектры комплексов переходных металлов	42
2.4. Люминесценция	52
Глава 3. Инфракрасная спектроскопия	63
3.1. Физическая природа явления	63
3.2. Силовая постоянная.....	67
3.3. Колебания многоатомных молекул.....	68
3.4. Концепция групповых колебаний и ее недостатки.....	70
3.5. Проведение структурного анализа по инфракрасным спектрам	75
Глава 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	79
4.1. Физическая природа явления	79
4.2. Химическое экранирование ядер. Химический сдвиг и его значения	83
4.3. Спин-спиновое взаимодействие между химически неэквивалентными ядрами.....	88
4.4. Динамические эффекты в спектрах ЯМР	97
4.5. ЯМР в биохимии и медицине.....	104

Глава 5. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса.....	115
5.1. Явление и метод электронного парамагнитного резонанса	115
5.2. Электронный эффект Зеемана. Атом водорода в магнитном поле	116
5.3. Заселенности спиновых уровней.....	120
5.4. Величина параметра g	122
5.5. Блок-схема ЭПР-спектрометра	123
5.6. Сверхтонкое взаимодействие	128
Глава 6. Рентгеновская спектроскопия (EXAFS- и XANES-спектры)	142
6.1. Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом.....	142
6.2. Закон рентгеновского поглощения в веществе	147
6.3. Структура края рентгеновских спектров поглощения	154
6.4. Получение структурной информации из EXAFS-спектров.....	163
6.5. Ближняя структура основного края рентгеновского спектра поглощения – XANES.....	173
6.6. Использование EXAFS-спектров для анализа локальной атомной структуры вещества.....	177
6.7. Экспериментальные методы измерений рентгеновских спектров поглощения.....	183
Тестовые задания ко всем методам	193
Литература.....	212