МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования**

**«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

 А.В. Князев

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| « | «29 | » |  | мая | 2018 г. |

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

(наименование дисциплины (модуля))

Уровень высшего образования

**бакалавриат**

(бакалавриат / магистратура / специалитет)

Направление подготовки / специальность

**04.03.01 «Химия»**

(указывается код и наименование направления подготовки / специальности)

**Химия и материаловедение**

(указывается профиль / магистерская программа / специализация)

Квалификация (степень)

**бакалавр**

(бакалавр / магистр / специалист)

Форма обучения

**очная**

(очная / очно-заочная / заочная)

Нижний Новгород 2018

1. **Место и цели дисциплины (модуля) в структуре ОПОП**

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» (Б1.В.03), является обязательной для освоения студентами очной формы обучения на третьем году обучения в пятом семестре.

Для освоения данной дисциплины студентам необходимо обладать базовыми знаниями по следующим разделам химии: строение вещества, неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, квантовая химия, а также владеть аппаратом математического анализа и физики в рамках преподаваемых на 1 и 2 курсе дисциплин.

Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее при дальнейшей практической деятельности в рамках выполнения квалификационных работ.

Курс отвечает основным требованиям в плане решения задачи по совер­шенствованию обуче­ния в высшей школе. Этот курс дает широкие знания фундаментальных положений науки, которые необходимы как для непосред­ственной работы по специальности, так и для понима­ния главных направле­ний химической науки и ее развития.

**Целью дисциплины** является знакомство с концептуальной базой и экспериментальными методами исследования современной химии, повышение эффективности химических исследований на пути их математизации и автоматизации.

**Задачами дисциплины** являются изучение теоретических и экспериментальных основ физических методов исследования, решение основных задач химии по идентификации и установлению строения веществ, динамики их превращений и изучению связи физических и химических свойств веществ со структурой, хорошо ориентироваться в методах исследования, знать их возможности, сильные и слабые стороны, уметь применять их к конкретным объектам; уметь предсказывать реальные физические и химические свойств веществ на основе экспериментальных данных о взаимосвязях между составом, структурой вещества с одной стороны, и физическими и химическими свойствами, с другой, а также их теоретическом осмыслении и обобщении. В методическом плане курс «Физические методы исследования» имеет задачу активизировать знания студентов по физике и математике, а также закрепить знания по пройденным разделам химии.

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

|  |  |
| --- | --- |
| **Формируемые компетенции****(код компетенции, уровень освоения – при наличии в карте компетенции)** | **Планируемые результаты обучения по дисциплине «Строение вещества», характеризующие этапы формирования компетенций** |
| *ОПК-2 (пороговый уровень)**Владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и**исследования химических веществ и реакций* | *В1 (ОПК-2) Владеть физическим основами основных инструментальных методов исследования в химии**У1 (ОПК-2) Уметь выбирать метод исследования для получения необходимой информации при характеризации веществ и изучении химических процессов**З1 (ОПК-2) Знать особенности постановки эксперимента по определению свойств веществ с помощью инструментальных методов анализа* |
| *ОПК-4 (пороговый уровень)**Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности* | *В1 (ОПК-4) Владеть математическим аппаратом для проведения необходимых расчетов при изучении химических веществ с использованием современных физических методов исследования**У1 (ОПК-4) Уметь решать стандартные аналитические и исследовательские задачи с помощью современных инструментальных методов анализа**З1 (ОПК-4) Знать основные законы физики и химии, необходимые для корректной постановки и проведения эксперимента по изучению свойств химических соединений с помощью инструментальных методов* |
| *ПК-1 (пороговый уровень)**Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам*  | *В1 (ПК-1) Владеть методиками анализа веществ с использование современного аналитического оборудования в рамках методов ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса, колебательной, микроволновой и электронной спектроскопий, рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии.**У1 (ПК-1) Уметь планировать и проводить стандартные аналитические операции по характеризации органических и неорганических веществ с использованием современных физических методов исследования**З1 (ПК-1) Знать рамки применимости различных инструментальных методов анализа для решения тех или иных исследовательских задач* |
| *ПК-5 (пороговый уровень)**Способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий* | *В1 (ПК-5) Владеть навыками работы с программным обеспечением современных аналитических приборов ведущих мировых производителей**У1 (ПК-5) Уметь получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современного программного обеспечения**З1 (ПК-5) Знать современные подходы к статистической обработке результатов эксперимента и их стандартизированному представлению.* |

1. **Структура и содержание дисциплины «Физические методы исследования»,**

Объем дисциплины (модуля) составляет 7 зачетных единиц, всего 252 часа, из которых 114 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (48 часа занятия лекционного типа, 64 часа практических занятий, 2 часа - контроль самостоятельной работы), 36 часов мероприятия текущего контроля успеваемости, 102 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины,** **форма промежуточной аттестации по дисциплине**  | **Всего****(часы)** | в том числе |  |
| **контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы** из них |  | **Самостоятельная работа обучающегося, часы** |
| **Занятия лекционного типа** | **Практические занятия** | **Всего**  |
| Общая характеристика и клас­сифи­кация методов исследо­вания | 14 | 3 | 5 | 8 | 6 |
| Метод ядерного магнитного резонанса | 18 | 5 | 7 | 12 | 6 |
| Метод электронного парамагнитного резонанса | 24 | 5 | 7 | 12 | 12 |
| Методы квадрупольного и гамма - резо­нанса ядер  | 23 | 5 | 6 | 11 | 12 |
| Микроволновая спектроско­пия | 23 | 5 | 6 | 11 | 12 |
| Колебательная спектроскопия | 23 | 5 | 6 | 11 | 12 |
| Методы электронной УФ-спектроскопии | 23 | 5 | 6 | 11 | 12 |
| Дифракционные методы | 24 | 6 | 6 | 12 | 12 |
| Методы масс-спектрометрии | 14 | 3 | 5 | 8 | 6 |
| Методы рентгеновской и фотоэлектронной (ФЭС) спектроскопии | 14 | 3 | 5 | 8 | 6 |
| Методы исследования оптически активных веществ | 14 | 3 | 5 | 8 | 6 |
| **Контроль самостоятельной работы** | **2** |  | **2** | **2** |  |
| **Промежуточная аттестация –****Экзамен (5 семестр)** | 36 |  |  |  |  |
| **Итого**  | **252** | **48** | **66** | **114** | **102** |

**3.1. Содержание разделов дисциплины**

**3.1.1. Общая характеристика и классификация методов исследования.**

Физические свойства атомов и молекул. Методы определения физических свойств. Прямая и обратная задачи. Понятие корректно и некорректно по­ставленных задач.

Спектр электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веще­ством: погло­щение, испускание, рассеяние. Спектроскопические и дифракци­онные методы. Соотноше­ние амплитуд рассеяния в дифракционных методах. Области применения рентгенографии, электронографии и нейтронографии в химии. Энергетические характеристики различных методов спектроскопии. Способы выражения спектра электромагнитного излучения.

Чувствительность и разрешающая способность методов. Характеристиче­ское время ме­тодов. Возможности методов и области их применения. Зависи­мость результатов одних методов от наличия данных других методов. Инте­грация физических и химических мето­дов исследования.

**3.1.2. Метод ядерного магнитного резонанса.**

Физические основы явлений ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Снятие вырожде­ния спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Спин ядра. Ядерный g-фактор. Ядерный магнетон. Относительная чувствитель­ность ядер к протонам. Условие ЯМР. Заселённость уровней энергии, насы­щение, релаксационные процессы и ширина сигнала.

Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Кон­станта экраниро­вания ядра. Спектр низкого разрешения. Абсолютный, истин­ный и относительный химиче­ские сдвиги, их определение и использование в химии. Шкалы химических сдвигов в протонном магнитном резонансе. Правила отбора. Основные параметры линии спектра (ши­рина, форма, ампли­тудная и интегральная интенсивности, резонансная частота). Спин-спино­вое взаимодействие ядер и его природа. Мультиплетная структура спектров ЯМР, распреде­ление интенсивности, правило сумм. Константы спин-спинового взаимодействия.

Анализ спектров ЯМР первого и не первого порядков. Приложение спек­тров ЯМР в хи­мии. Протонный магнитный резонанс. ЯМР на углероде - 13 и других ядрах. Метод двойного резонанса. Изучение быстропротекающих процессов (химического обмена ядер, внутреннего вращения). Химическая поляризация ядер. Структурный анализ.

Техника и методика эксперимента ЯМР. Блок-схема спектрометра ЯМР. Типы спектро­метров. Фурье-спектроскопия и двумерная спектроскопия ЯМР. Зависимость спектров ЯМР от условий съемки (растворителей, однородности поля, скорости развертки и т.д.). Характер образцов. Достоинства и ограниче­ния метода ЯМР и сравнение его с другими методами.

**3.1.3. Ме­тод электронного парамагнитного резонанса.**

Физические основы явления электронного парамагнитного (спинового) резонанса (ЭПР). Поведение электрона в магнитном поле. Спин электрона. Условие ЭПР. Же-фактор и его зна­чение. Магнетон Бора. Нормальный и ано­мальный эффекты Зеемана. Спин-решеточная (продольная) и спин-спиновая (поперечная) релаксации. Тонкая структура спектров ЭПР. Крамерсовское расщепление в отсутствие внешнего магнитного поля, в нулевом поле, для анизотропных систем. Пра­вила отбора. Эффективное квантовое число, g - фактор ионов пе­реходных металлов. Примеры.

Структурные исследования в методе ЭПР. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаи­модействии с одним или несколькими ядрами. Константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Мультиплетность и распределение ин­тенсивности спектра ЭПР. Треугольник Пас­каля. Основные параметры линии спектра ЭПР (резонансное значение напряженности маг­нитного поля и g -фактор, интенсивность, ширина и форма линии). Механизмы СТВ. Вид спек­тра ЭПР для изотропных и анизотропных систем.

Применение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реак­ций. Химическая поляризация электронов. Стабилизация и определение сво­бодных радикалов и других пара­магнитных центров. Органические и неорга­нические радикалы, ион-радикалы, молекулы в триплетном состояниях, ком­плексы переходных металлов, F- и V- центры. Методы спино­вых меток и спиновых ловушек. Блок - схема ЭПР - спектрометра. Особенности экспе­ри­мента, достоинства и недостатки метода.

**3.1.4. Методы квадрупольного и гамма - резо­нанса ядер**

**3.1.4.1. Метод ядерного квадрупольного резонанса.**

Принципы метода ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). Ядерный квадруполь, его размерность и симметрия. Градиент электрического поля и его взаимодействие с ядром. Константы квадрупольного взаимодействия. Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля. Параметр асимметрии поля и уровни энергии.

Приложение метода ЯКР в химии и его возможности,интенсивность, ширина, час­тота и мультиплетность переходов в ЯКР. Химическаяи кристал­лографическая неэквива­лентности ядерных квадруполей. Зеемановское рас­щепление в ЯКР.Незаконченность тео­рии, особенность эксперимента. При­меры.

**3.1.4.2. Метод ядерного гамма - резонанса.**

Эффект Мессбауэра и условия его наблюдения. Ядерная изомерия. Энергия отдачи и допплеровское уширение. Энергия испускаемых и поглощаемых гамма-кван­тов. Получение мессбауэровских спектров и их интерпретация в химии. Влияние химиче­ского окружения ядер на эффект Мессбауэра. Хими­ческий (изомерный) сдвиг. Квадру­польные и магнитные взаимодействия. Возможности применения эффекта Мессбауэра в химии и его ограничения. Квадрупольное расщепление и изомерные сдвиги для высоко - и низкоспи­новых комплексов железа. Техника и особенности эксперимента.

**3.1.5. Микро­волновая спектроскопия.**

Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и враща­тельной состав­ляющих. Приближение Борна-Оппенгеймера. Вращательные состояния двухатомной мо­лекулы согласно квантовой механике в приближе­нии жесткого и нежесткого (колеблюще­гося) ротатора. Постоянные колеба­тельно-вращательного взаимодействия и центробеж­ного растяжения. Систе­мы вращательных уровней энергии и их заселенность. Функция распределе­ния. Энергетические переходы.

Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем. Поля­ризация диэлек­трика. Ориентационная поляризация и ее связь с диэлектриче­ской проницаемостью и дипольным моментом молекул. Эффект Штарка. Средний дипольный момент по всем уровням вращательной энергии. Определение дипольного момента в газах (первый метод Дебая) и раство­рах (второй метод Дебая). Условия измерений дипольных моментов молекул. Применение данных по дипольным моментам молекул для определения их симметрии и конформации.

Методы наблюдения вращательных спектров. Спектры поглощения, ис­пускания и рассеивания. Основные характеристики и способы выражения спектра электромагнитного излучения. Условия получения микроволнового спектра полярными молекулами. Область частот. Матричный элемент дипольного момента перехода. Правила отбора. Интенсив­ность линий в спек­трах. Барьер вращения метильной группы, определяемый из микровол­новых спектров. Приближение большого барьера вращения. Определение геометри­ческих параметров молекул из микроволновых спектров. Метод изотопиче­ского замещения. Фи­зический смысл параметров: re, r0, rs, rz, rg. Примеры. Вращательные спектры многоатом­ных молекул. Линейные молекулы. Молекулы типа симметричного, сферического и асимметричного волчков. Система вращательных уровней энергии многоатомных моле­кул. Определение дипольных моментов молекул из микроволновых спек­тров.

Вращательные спектры комбинационного рассеяния (КР) двухатомных и многоатомных молекул. Схема эксперимента. Использование лазера. Усло­вия получения и вид спектра. Правила отбора. Определение геометрических параметров неполярных молекул. Ограни­чение метода. Схемы радиоспектрометров. Использование Фурье-спектрометров для иссле­дования ван-дер-ваальсовых молекул и малостабильных молекул.

**3.1.6. Колебательная спектроскопия.**

Колебательные состояния молекул согласно классической теории. Колеба­тельные степени свободы. Колебания двухатомной молекулы. Функция гар­монического осциллятора. Ан­гармонический осциллятор. Потенциал Морзе. Силовая постоянная молекулы. Частота колебаний. Уравнения движения ядер в двух- и многоатомных молекулах. Нормальные координаты и колеба­ния. Формы и частоты нормальных колебаний. Валентные, деформа­ционные плоскостные и внеплоскостные, маятниковые, крутильные, веерные, пульсаци­онные, зонтичные, ножничные и другие виды нормальных колебаний. Симметрия нор­мальных колебаний, координаты симметрии.

Квантово-механический подход к описанию колебательных состояний молекул. Коле­бательная волновая функция. Уровни колебательной энергии двух- и многоатомных моле­кул в приближении гармонического и ангармони­ческого осцилляторов. Коэффициент ан­гармоничности. Энергия диссоциации двухатомной молекулы. Фундаментальные, обер­тонные, составные и разно­стные частоты. Резонанс Ферми. Формы нормальных колеба­ний и система колебательных уровней энергии молекул Н2О и СО2.

Методы наблюдения колебательных спектров. Спектры испускания, по­глощения (ИК-спектры) и комбинационного рассеяния (КР-спектры). Правила отбора для колебательных и колебательно-вращательных спектров. Интенсив­ность линий в спектрах. Вращательная структура в колебательных спектрах ИК поглощения (Р- и R- ветви) и в спектрах КР (О- , Q- и S- ветви). Вид спектров. Интенсивность линий в спектрах.

Анализ нормальных колебаний по экспериментальным данным. Сопоставление ИК- и КР- спектров и выводы о симметрии молекулы. Правило исклю­чения. Исполь­зование контуров вращательной структуры ИК-полос поглоще­ния газов для интерпретации спектра. Характеристичность нормальных коле­баний. Концепция групповых частот и её не­достатки.

Применение методов колебательной спектроскопии для количественного и качествен­ного анализа веществ и другие применения в химии. Органические и неорганические ве­щества. Полимеры. Проблема окружающей среды.

Техника и методики ИК и КР спектроскопии. Выбор оптимальных условий получения ИК спектров. Методы подготовки образцов. Прозрачные материа­лы. Аппаратура ИК спек­троскопии. Метод нарушенного полного внутренне­го отражения (НПВО) для «неудоб­ных» объектов (смолы, пищевые продук­ты, сырая резина и т.п.). Аппаратура спектроско­пии КР. Лазерные источники возбуждения. Сравнение методов ИК и КР спектроскопии, их достоинства и недостатки.

**3.1.7. Методы электронной УФ-спектроскопии**

Теория молекулярных орбиталей (МО) как основа интерпретации элек­тронных спек­тров. МО двухатомных молекул. Молекулярные термы и прин­ципы их классификации. Характеристики электронных состояний много­атомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жиз­ни. Симметрия и номенклатура электронных состоя­ний молекул. Энергетиче­ские переходы и возникновение спектров поглощения органиче­ских молекул. Квантово-механическая вероятность перехода и сила осциллятора. Дипольный момент перехода и коэффициент Эйнштейна B12. Классификация перехо­дов по Малли­кену и Каша. Переходы классов N—V, N—*Q* и N—R.

Абсорбционная спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) об­ластях, как ме­тод исследования электронного строения молекул. Правила от­бора и нарушения запрета. Принцип Франка-Кондона. Законы поглощения света Бугера-Ламберта-Бера. Коэффици­ент экстинкции. Прозрачные раство­рители. Способы изображения, условия получения и основные характеристи­ки электронного спектра.

Эмиссионная ультрафиолетовая (УФ) спектроскопия. Дезактивация электронной энергии. Спектры флуоресценции и фосфо­ресценции. Определение молекулярных постоянных. Действие лазера.

Применение электронных спектров в качественном, структурном и коли­чественном анализах. Концепция хромофоров и ауксохромов. О специфике электронных спектров по­глощения различных классов соединений. Отнесе­ние электронных переходов. Критерии отнесения полос к различным перехо­дам. Спектры сопряженных систем. Классификация полос поглощения по Бураве и Брауде: К- , R- , В- и Е- полосы. Интенсивность полос раз­личных переходов. Использование изобестической точки в количественном анализе.

Техника и методики эмиссионной и абсорбционной спектроскопии в ви­димой и УФ областях, аппаратура, исследуемые образцы, чувствительность методов.

**3.1.8. Дифракционные методы.**

**3.1.8.1. Рентгеновская кристаллография.**

Кристаллы и их основные свойства. Симметрия кристаллов. Группы трансляций. Кристал­лические классы, системы, сингонии, категории. Симво­лы Шенфлиса и Германа-Могена. Эле­ментарная ячейка. Типы решеток Бравэ. Симметрия решеток. Индексы узла, ряда, плоскости. Об­ратная решетка. Зави­симость межплоскостных расстояний от симметрии и параметров решетки кристалла. Пространственная решетка и структура кристаллов. Трансляционные операции симметрии. Элементы симметричности и их комбинации с трансляциями. Про­странственные группы симметрии и их символика. Описание и систематика кристаллических структур. Важнейшие струк­турные типы простых веществ, бинарных и тернарных соединений. Кристал­лохимия синдикатов. Органическая кри­сталлохимия. Структуры полимеров и биополимеров. Описание структур в терминах шаровых упаковок и кладок. Полиэдрический метод изображения структур. Координационные, цепочеч­ные, островные, слоистые и каркасные структуры. Структуры с неоднород­ными фрагментами. Структурные классы. Структуры со статистической и не­полной упорядоченностью. Морфотро­пия, изоморфизм, полиморфизм, струк­турная гомология и политипия.

Рентгеноструктурный анализ - основной экспериментальный метод ис­следования кристал­лов. Получение и взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Характеристическое и "бе­лое" излучение. Селективные фильтры. Методы регистрации рентгеновских лучей. Основы теории рассеяния рентге­новских лучей. Атомная и структурная амплитуда рассеяния. Условия Лауэ. Уравнение Брэгга-Вульфа. Три метода рентгенографии: метод Лауэ, метод вращения, метод по­рошка. Рентгенофазовый анализ.

Основные этапы анализа структуры кристалла. Определение параметров решетки. Индицирование рентгенограмм кристаллов высшей и средней категорий. Индицирование методом подбора изо­структурного соединения. Опреде­ление симметрии кристаллической структуры. Формула электронной плотности (ряд Фурье). Проблема начальных фаз. Метод проб и ошибок. Фактор расходимости. Функция Паттерсона и метод тяжелого атома. Статистические прямые методы. Уточнение структуры. Исследование дета­лей распределения электронной плотности. Деформационная электронная плот­ность. Системати­ческие и случайные ошибки. Автоматизация рентгеноструктурного анализа. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Параметр Де-Вольфа.

**3.1.8.2. Газовая электронография.**

Уравнения потока электронов для плоских и сферических волн. Рассеяние электронов на сферическом потенциале. Атомное рассеяние в борновском приближении. Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний. Кривая ради­ального распределения. Рассеяние электронов двухатомной молекулой в гармоническом прибли­жении колебания ядер. Схема эксперимента. Условия получения электронограмм. Визуальный метод. Секторный метод. Совместное использование газовой электронографии и микроволновой спектроскопии.

**3.1.8.3. Дифракция нейтронов.**

Основные принципы дифракции нейтронов. Источники и детекторы ней­тронов. Факторы рассеяния. Различия между дифракцией нейтронов и ди­фракцией рентгеновских лучей. Маг­нитное рассеяние. Структура сесквикарбоната натрия.

**3.1.9. Методы масс-спектрометрии.**

Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электростатиче­ское неоднородное поле, химическая ионизация. Комбинированные методы. Ионный ток и сечение ионизации. За­висимость сечения ионизации от энер­гии ионизирующих электронов. Потенциалы появления ионов. Вертикальные и адиабатические электронные переходы. Диссоциативная ионизация. Типы ионов в масс-спектрометрах: молекулярные, осколочные, метастабильные, перегруппиро­вочные, многозарядные и отрицательные.

Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Фокусирующее действие однород­ного поперечного магнитного поля. Электростатическая фокусировка. Двойная фокусировка. Разрешающая сила масс-спектрометра. Ионный источник. Система напуска. Молекулярное тече­ние газа. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса.

Применение масс-спектрометрии в химии. Идентификация веществ. Роль разрешения, по­тенциалов появления, методов ионизации, метастабильных ио­нов в идентификации веществ. Таблицы массовых чисел. Соотношение изо­топов.

Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измере­ние потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Преимущества фотоионизации.

Термодинамические исследования. Определение парциальных давлений компонентов газо­вых смесей. Условия испарения вещества. Диффузионная ячейка Кнудсена. Связь ионного тока с парциальным давлением пара в ячейке Кнудсена. Определение теплоты сублимации веществ, теплоты реакции и константы равновесия. Проблема расшифровки масс-спектра. Метод перегре­ва для чистых веществ. Метод изотермического испарения для двухкомпонентных веществ.

**3.1.10. Методы рентгеновской и фотоэлектронной (ФЭС) спектроскопии**

Общие принципы. Схема возникновения фотоэлектронной эмиссии, рент­геновского поглощения, флуоресценции и Оже-электронов. Параметры и структура фотоэлектронных спектров (ФЭС). Химический сдвиг в ФЭС и его интерпретация. Интенсивность фотоэлек­тронных пиков. Глубина выхода фо­тоэлектронов. Сравнение метода ФЭС и рентгеновской спектроскопии. Осо­бенности Оже-спектроскопии. Техника и методика эксперимента. Рентгено-флуоресцентные спектрометры.

Применение методов фотоэлектронной спектроскопии в химии. Струк­турно-аналити­ческое применение. Количественный анализ. Теоретическое моделирование и объяснение химических сдвигов. Определение химических элементов и энергий связи электронов на внешних и внутренних оболочках атомов. Применение метода для исследования твердых тел.

**3.1.11. Методы исследования оптически активных веществ**

**3.1.11.1. Дисперсия оптического вращения.**

Круговая поляризация луча света. Квантово-механическое рассмотрение оптической активности и спиральная модель молекулы. Вращение плоскости поляризации плос­кополяризованного света. Вращательная сила перехода. Ус­ловия вращения плоскости поляриза­ции. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона - аномальная дисперсия. Схема экспе­римента. Применение к изучению строения молекул оптически активных веществ. Правило окта­нов.

**3.1.11.2. Оптический круговой дихроизм.**

Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дих­роизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область при­менения в стереохимии и электронном строе­нии оптически активных веществ.

1. **Образовательные технологии**

Лекционный курс базируется на ряде специально разработанных интерактивных презентаций. Лекционный курс сопровождается рядом практических занятий, представляющих собой сочетание рассмотрения некоторых частных аспектом теоретических проблем дисциплины и решения практических задач, типичных для научно-исследовательской работы профессиональных ученых-химиков. Также дисциплина подразумевает самостоятельную работу студентов с современной литературой и веб-ресурсами.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, в целом в учебном процессе составляет 75% аудиторных занятий.

1. **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

Самостоятельная работа студентов включает работу в читальном зале библиотеки, в учебных кабинетах (лабораториях) и в домашних условиях, с доступом к ресурсам Интернет для подготовки к устному опросу и контрольным работам и тестам.

К формам текущего контроля успеваемости дисциплины относится следующее:

* Устный опрос
* Контрольная работа «Графическое индицирование порошковой рентгенограммы»
* Проверка отчетов по темам практических занятий

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проходит в форме **экзамена.**

К экзамену в 5-ом семестре допускаются обучающиеся, выполнившие все практические работы на момент сдачи экзамена, и имеющие зачтенные преподавателем, ведущим практические занятия, отчеты по темам лабораторных работ.

1. **Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине, включающий:**

**6.1. Перечень компетенций** выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, в которых участвует дисциплина «Строение вещества», приведены в таблице.

**ОПК-2 -** Владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций.

Общепрофессиональная компетенция выпускника программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 **«Химия».**

Уровни освоения компетенций: пороговый.

**ОПК-4 -** Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности

Общепрофессиональная компетенция выпускника программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 **«Химия».**

Уровни освоения компетенций: пороговый.

**ПК-1** – способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Профессиональная компетенция выпускника программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 **«Химия».**

Уровни освоения компетенций: пороговый.

**ПК-5** – способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.

Профессиональная компетенция выпускника программы бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 **«Химия».**

Уровни освоения компетенций: пороговый.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Уровень освоения компетенций** | **Планируемые результаты обучения** (показатели достижения уровня освоения компетенций) | **Критерии оценивания результатов обучения** |
| **1** | **2** | **3** | **4** | **5** |
| **Первый уровень** (пороговый) **(ОПК-2) – I** – способность проводить ипротоколировать простыехимические эксперименты | Владеть базовыми навыкамипроведения химическогоэксперимента и оформления егорезультатов В1 (ОПК-2) - I | Не владеет | Владеет навыкамисинтеза,идентификации иизучения свойствотдельных веществ | Владеет базовыминавыками синтеза,идентификации иизучения свойствнесложных веществ | Владеет навыкамисинтеза,идентификации иизучения свойствотдельных классоввеществ(материалов), правильногопротоколированияопытов | Владеет навыкамисинтеза,идентификации иизучения свойстввеществ иматериалов,правильного протоколированияопытов |
| Уметь:проводить простые химические опытыпо предлагаемым методикамУ1 (ОПК-2) – I | Не умеет | Умеет проводитьпростой анализ иодностадийныйсинтез по готовойметодике безоформленияпротокола опытов | Умеет проводитьодно- идвухстадийныйсинтез попредлагаемойметодике с выходомцелевого продуктаменее 50% отзаявленного вметодике; анализполученноговещества одним изстандартныхметодов. Допускаетотдельные ошибкипри оформлениипротоколаэксперимента | Умеет проводитьодно- идвухстадийныйсинтез попредлагаемойметодике с выходомцелевого продуктаболее 50% отзаявленного;идентификацию иисследованиесвойствполученныхвеществ иматериалов. Умеетоформлятьрезультатыэксперимента снебольшимколичествомзамечаний | Умеет выполнятьдемонстративныеопыты по химии;одно- идвухстадийныйсинтез попредлагаемойметодике с выходомцелевого продуктасогласнозаявленному вметодике; проводитькомплексный анализи исследованиесвойств полученныхвеществ иматериалов. Умеетоформлятьрезультатыэксперимента всоответствии сзаявленнымитребованиями |
| Знать:стандартные методы получения,идентификации и исследованиясвойств веществ и материалов,правила обработки и оформлениярезультатов работы, нормы ТБ З1 (ОПК-2) - I | Не знает | Затрудняется ввыборе методаполучения,идентификации иисследованиясвойств указанноговещества, не знаеттребований коформлениюрезультатовэксперимента инорм ТБ | Имеет общеепредставление ометодах получения,идентификации иисследованиясвойств отдельных классов веществ,правилахбезопасногообращения с ними испособахпредставлениярезультатовэксперимента | Знает стандартныеметоды получения,идентификации иисследованиясвойств различныхгрупп веществ и материалов;правила ТБ приработе с ними,основныетребования коформлениюрезультатовэксперимента, нодопускаетотдельныенеточности | Знает стандартныеметоды получения,идентификации иисследованиясвойств различныхгрупп веществ и материалов; правилатехникибезопасности приработе с ними,основныетребования коформлениюрезультатовэксперимента |
| **Первый уровень** (пороговый) **(ОПК-4) – I** – Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационнокоммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности | Владеть:навыками работы с научными иобразовательными порталами В1 (ОПК-3) - I | Не владеет | Затрудняется впоискепрофессиональнойинформации всети Интернет | Владеетначальныминавыками работыс научными иобразовательнымипорталами | Владеет навыкамисоставлениязапросов дляпоисканеобходимойинформации нанаучных иобразовательныхпорталах в сетиИнтернет | Владеет навыкамиполучения общейнаучнотехническойинформации всети Интернет |
| Владеть:базовыми навыками применениястандартного программного обеспечениядля обработки результатов исследованийи представления их научномусообществуВ2 (ОПК-4) – I | Не владеет | Способениспользоватьстандартноепрограммноеобеспечение дляобработкирезультатовисследований иподготовкипрезентаций принепосредственнойпомощисотрудника болеевысокойквалификации | Владеетпервичныминавыкамиприменениястандартныхпрограмм дляобработкиэкспериментальных данных, наборатекстов ипостроенияпростых графиков | Владеет базовыминавыкамиприменениястандартныхпрограмм дляобработкиэкспериментальных данных,форматированиятекстов,построенияграфиков ирисунков | Способен всжатые срокиосвоить новоепрограммноеобеспечение подруководствомспециалиста болеевысокойквалификации,способенподготовитьтезисы доклада ипрезентацию позаданной теме приналичии шаблона |
| Уметь:проводить первичный поискинформации для решенияпрофессиональных задачУ1 (ОПК-4) – I | Не умеет | Испытываетзатруднения впоследовательности операций исоставлениипоисковогозапроса | Умеет составитьзапрос для поисканеобходимойнаучной иобразовательнойинформации послеконсультации соспециалистомболее высокойквалификации | Умеет корректносоставить запросдля поиска общейинформации позаданной теме нанаучных иобразовательныхпорталах в сетиИнтернет | Умеет находитьобщуюинформацию длярешенияпрофессиональных задач |
| Уметь:применять стандартное программноеобеспечение при решении химических иматериаловедческих задач, приподготовке научных публикаций идокладовУ2 (ОПК-4) – I | Не умеет | Умеетиспользоватьотдельныефункции наиболеераспространенныхпрограммныхпродуктов приобработкеэкспериментальных данных иподготовкенаучныхпубликаций идокладов | Умеетиспользоватьосновныефункции наиболеераспространенныхпрограммныхпродуктов приобработкеэкспериментальных данных иподготовкенаучныхпубликаций идокладов | Умеетиспользоватьстандартноепрограммноеобеспечение приобработкеэкспериментальных данных иподготовкенаучныхпубликаций идокладов | Умеетиспользоватьнесколькопрограммныхпродуктов дляобработкиэкспериментальных данных иподготовкинаучныхпубликаций идокладов |
| Знать:основные источники информации длярешения задач профессиональной сферыдеятельностиЗ1 (ОПК-4) –I | Не знает | Знает названиянесколькихосновныхроссийскихнаучных иобразовательныхпорталов похимии | Знает структуру исодержаниеосновныхроссийскихнаучных иобразовательныхпорталов похимии, нодопускаетотдельныенеточности | Знает структуру исодержаниеосновныхроссийскихнаучных иобразовательныхпорталов похимии, правиласоставленияпоисковыхзапросов | Знает структуру исодержаниеосновныхроссийских имеждународныхнаучных иобразовательныхпорталов похимии, правиласоставленияпоисковыхзапросов |
| Знать:основы информационных технологий,основные возможности и правила работысо стандартными программнымипродуктами при решениипрофессиональных задачЗ2 (ОПК-4) –I | Не знает | Знает устройствокомпьютера,назначение егоосновных рабочихузлов | Знает основныеправила«компьютернойгигиены»,требованияинформационнойбезопасностиприменительно кпрофессиональнойсфередеятельности | Знает типыоперационныхсистем и основныевозможностиMicrosoft Officeдля решения задачпрофессиональнойсферыдеятельности | Знает основныеправила и приемысоставлениябиблиографических баз данных сиспользованиемстандартногопрограммногообеспечения |

При изучении дисциплины «Физические методы исследования» студенты получают следующие знания, умения и владения в рамках освоения компетенций ОПК-2, ОПК-4, ПК-1, ПК-5:

З1 (ОПК-2) Знать особенности постановки эксперимента по определению свойств веществ с помощью инструментальных методов анализа;

З1 (ОПК-4) Знать основные законы физики и химии, необходимые для корректной постановки и проведения эксперимента по изучению свойств химических;

З1 (ПК-1) Знать рамки применимости различных инструментальных методов анализа для решения тех или иных исследовательских задач;

З1 (ПК-5) Знать современные подходы к статистической обработке результатов эксперимента и их стандартизированному представлению;

В1 (ОПК-2) Владеть физическим основами основных инструментальных методов исследования в химии;

В1 (ОПК-4) Владеть математическим аппаратом для проведения необходимых расчетов при изучении химических веществ с использованием современных физических методов исследования;

В1 (ПК-1) Владеть методиками анализа веществ с использование современного аналитического оборудования в рамках методов ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса, колебательной, микроволновой и электронной спектроскопий, рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии;

В1 (ПК-5) Владеть навыками работы с программным обеспечением современных аналитических приборов ведущих мировых производителей;

У1 (ОПК-2) Уметь выбирать метод исследования для получения необходимой информации при характеризации веществ и изучении химических процессов;

У1 (ОПК-4) Уметь решать стандартные аналитические и исследовательские задачи с помощью современных инструментальных методов анализа соединений с помощью инструментальных методов;

У1 (ПК-1) Уметь планировать и проводить стандартные аналитические операции по характеризации органических и неорганических веществ с использованием современных физических методов исследования;

У1 (ПК-5) Уметь получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современного программного обеспечения.

**6.2. Описание шкал оценивания**

Промежуточный контроль качества усвоения студентами содержания дисциплины проводится в виде комплексного экзамена, на котором определяется:

* уровень усвоения студентами основного учебного материала по дисциплине;
* уровень понимания студентами изученного материала;
* способности студентов использовать полученные знания для решения конкретных задач.

Экзамен в 5 семестре проводится в устной форме в виде ответа обучающегося на теоретические вопросы курса (с предварительной подготовкой), решении практических задач и последующим собеседованием в рамках тематики курса. Собеседование проводится в форме вопросов, на которые студент должен дать краткий ответ

**Для проведения промежуточного контроля сформированности компетенции используется ответ по билету на экзамене.**

|  |  |
| --- | --- |
| **Оценка** | **Уровень подготовки** |
|  |  |
| Зачтено | Знание основного содержания разделов дисциплины, допускаются не­точности, нарушения в последователь­ности изложения материала. Правильное применение теоретических знаний для решения практических задач. Допускаются незначитель­ные ошибки в решении расчетных задач. |
| Незачтено | Незнание значительной части основного содержания разделов дисци­плины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин по­следующих курсов. |
| Превосходно | Высокий уровень подготовки, безупречное владение теоретическим материалом, студент демонстрирует творческий поход к решению нестандартных ситуаций. Студент дал полный и развернутый ответ на все теоретические вопросы билета. Студент активно работал на практических занятиях, чему подтверждением является высокий средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы\*.  |
| Отлично | Высокий уровень подготовки с незначительными ошибками. Студент дал полный и развернутый ответ на все теоретические вопросы билета. Студент активно работал на практических занятиях, имеет высокие средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы.  |
| Очень хорошо | Хорошая подготовка. Студент дал полный ответ на все теоретические вопросы билета, но допустил небольшие неточности в определениях понятий, процессов и т.п. Студент активно работал на практических занятиях, имеет высокие средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы. |
| Хорошо | В целом хорошая подготовка с заметными ошибками или недочетами. Студент дал ответ на все теоретические вопросы билета, но допустил неточности в определениях понятий, процессов и т.п. Студент работал на практических занятиях, имеет хорошие средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы. |
| Удовлетворительно | Минимально достаточный уровень подготовки. Студент показал минимальный уровень теоретических знаний, сделал существенные ошибки при ответе на экзаменационный вопрос. Студент посещал практические занятия, но имеет низкие средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы. |
| Неудовлетворительно | Подготовка недостаточная и требует дополнительного изучения материала. Студент дал ошибочные ответы на теоретические вопросы билета. Студент посещал практические занятия, но имеет очень низкие средний балл за текущую успеваемость и оценки за контрольные работы. |
| Плохо | Студент отказался отвечать на экзаменационный билет.  |

\*информация предоставляется преподавателем, ведущим практические занятия.

**6.3. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине, характеризующих этапы формирования компетенций**

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие процедуры и технологии:

- ***письменные ответы*** на вопросы контрольной;

- ***устные ответы на вопросы при фронтальном опросе*** на практических занятиях;

*-* ***устный ответ*** на экзамене (5 семестр)

Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие процедуры и технологии:

- ***практические контрольные задания*** (ПКЗ), включающие выполнение одной или нескольких задач.

* 1. **Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций.**

***Примерные вопросы (контрольная работа по теме «Графическое индицирование порошковой рентгенограммы») для оценки сформированности знаний компетенции ОПК-2, ОПК-4:***

1. Рентгенограмма Mo (кубическая сингония), полученная на MoK-излучении ( = 0.7107 Å), содержит рефлексы на следующих углах 2: 18.39; 26.12; 32.13; 37.27; 41.87; 46.08º. Проиндицируйте эти рефлексы и рассчитайте параметр (a) и объем (V) элементарной ячейки **(ОПК-2)**
2. Рентгенограмма Mn3Si (кубическая сингония), полученная на CuKα-излучении (λ = 1.5418 Å), содержит рефлексы на следующих углах 2θ: 26.98; 31.25; 44.78; 53.06; 65.18; 82.56º. Проиндицируйте эти рефлексы и рассчитайте параметр (a) и объем (V) элементарной ячейки **(ОПК-4)**

***Примерный перечень вопросов (экзамен)*** ***для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1, ПК-5:***

**Тема 1. Общая характеристика методов (ПК-1)**

Классификация методов по областям электромагнитного излучения.

Виды взаимодействия излучения с вещест­вом и изображение спектров.

Области применения рентгенографии, электронографии и нейтронографии в химии. Чувствительность, разре­шающая способность и характеристическое время метода.

**Тема 2. Метод ядерного магнитного резонанса (ПК-5)**

 Физические основы явлений ядерного маг­нитного резонанса (ЯМР).

Основные параметры линии спектра ЯМР (ши­рина, форма, ампли­тудная и интегральная интенсивности, резонансная частота).

Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР.

Мультиплетная структура спектров ЯМР, рас­пределение интенсивности, правила отбора.

Анализ спектров ЯМР первого порядка.

 Применение спектров ЯМР в хи­мии.

Типы спектрометров. Фурье-спектроскопия.

**Тема 3. Метод электронного парамагнитного резонанса (ПК-1)**

Физические основы явления электронного парамагнитного (спинового) резонанса (ЭПР). Релаксационные процессы в спектрах ЭПР и ЯМР.

Основные параметры линии спектра ЭПР.

Тонкая структура спектров ЭПР анизотропных систем.

Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимо­действии с одним или несколькими ядрами. Мультиплетность и распределение ин­тенсивности спектра ЭПР.

 Структурные исследования в методе ЭПР.

Приложение метода ЭПР в химии.

Изучение механизмов химических реак­ций.

 Блок-схема ЭПР - спектрометра.

Особенности эксперимента, достоинства и недостатки метода.

**Тема 4. Методы квадрупольного и гамма - резо­нанса ядер (ПК-5)**

Принципы метода ядерного квадруполь­ного резонанса (ЯКР).

 Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля.

Пара­метр асимметрии поля и уровни энергии.

Интенсивность, ширина, частота и мультиплетность переходов в ЯКР.

Зеемановское рас­щепление в ЯКР.

Приложение метода ЯКР в химии и его возможности.

Незаконченность тео­рии, особенность эксперимента. При­меры.

Эффект Мессбауэра и условия его наблюдения.

 Влияние химического окру­жения ядер на эффект Мессбауэра.

Квадрупольное расщепление для высо­ко- и низкоспиновых комплексов же­леза.

 Магнитные взаимодействия в гамма-резонансной ядерной флуоресценции.

 Возможности применения эффекта Мессбауэра в химии и его ограничения.

**Тема 5. Микроволновая спектроскопия (ПК-1)**

Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем.

Определение дипольного момента в газах (первый метод Дебая) и раство­рах (второй метод Дебая).

Применение данных по дипольным моментам молекул для определения их симметрии и конформации.

Вращательные состояния двухатомной мо­лекулы согласно квантовой механике в приближе­нии жесткого и нежесткого (колеблюще­гося) ротатора.

Систе­мы вращательных уровней энергии и их заселенность. Функция распределе­ния.

Методы наблюдения вращательных спек­тров.

Основные характеристики и способы выражения спектра электромагнитного излучения. Матричный элемент дипольного момента перехода. Правила отбора. Интен­сивность линий в спектрах.

Определение геометрических параметров молекул из вращательных спек­тров.

Вращательные спектры многоатомных молекул.

Схемы радиоспектрометров.

**Тема 6. Колебательная спектроскопия (ПК-5)**

Классический и квантовые подходы к описанию колебательных состояний моле­кул.

 Колебания двухатомной молекулы. Энергия диссоциации двухатомной молекулы.

Уравнения движения ядер в двух- и многоатомных молекулах.

Нормальные координаты и колеба­ния. Формы и частоты нормальных колебаний.

Уровни колебательной энергии двух- и многоатомных моле­кул в приближении гармонического и ангармони­ческого осцилляторов.

Формы, частоты и система колебательных уровней энергии молекул Н2О и СО2.

Методы наблюдения колебательных спектров. Правила отбора. Вид спектров.

Вращательная структура в колебательных спектрах.

Концепция групповых частот и её недостатки.

Применение методов колеба­тельной спектроскопии для количественного ана­лиза веществ. Техника и методики ИК и КР спектроскопии.

Выбор оптимальных условий по­лучения ИК спек­тров.

Сравнение методов ИК и КР спектроскопии, их достоинства и недостатки.

**Тема 7. Методы электронной УФ-спектроскопии (ПК-1)**

Теория молекулярных орбиталей (МО) как основа интерпретации электрон­ных спектров.

Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функ­ции, мультиплетность, время жизни.

Квантово-механическая вероятность перехода и сила осцил­лятора.

Абсорбционная спектроскопия. Правила отбора и нарушения запрета.

Эмиссионная (УФ) спектроскопия. Спектры флуоресценции и фосфоресценции.

Законы поглощения света Бугера-Ламберта-Бера.

Способы изображения, условия получения и основные характеристи­ки электронного спектра.

Применение электронных спектров в качественном, структурном и ко­личест­венном анализах. Концепция хромофоров и ауксохромов.

Техника и методики эмиссионной и абсорбционной спектроскопии в види­мой и УФ областях, аппаратура, исследуемые образцы, чувствительность ме­тодов.

**Тема 8. Дифракционные методы (ПК-5)**

 **Рентгеновская кристаллография.**

Кристаллы, их основ­ные свойства, кристал­лические классы, системы, сингонии, категории.

Типы решеток Бравэ.

Пространственная решетка и структура кристаллов.

Важнейшие структурные типы простых веществ, бинарных и тернарных со­единений. Полиэдрический метод изображения структур.

Координационные, цепочечные, островные, слоистые и каркасные структуры.

Структурные классы. Структуры со статистической и не­полной упорядоченностью.

Морфотро­пия, изоморфизм, полиморфизм, струк­турная гомология и политипия.

Получение и взаимодействие рентгеновских лучей с веществом.

Основы теории рассеяния рентгеновских лучей. Условия Лауэ. Уравнение Брэгга-Вульфа. Рентгенофазовый анализ.

Основные этапы анализа структуры кристалла.

Индицирование рентгенограмм кристаллов высшей и сред­ней категорий.

 Ин­дицирование рентгенограмм методом подбора изоструктурного соединения.

 **Газовая электронография.**

Рассеяние электронов на сферическом потенциале и жесткой молекулой.

 Рассеяние электронов двухатомной молекулой в гармоническом прибли­жении колебания ядер. Схема эксперимента. Условия получения электронограмм.

Совместное использование газовой электронографии и микроволновой спектроскопии.

**Дифракция нейтронов.**

Основные принципы дифракции нейтронов.

Источники и детекторы ней­тронов.

Факторы рассеяния.

Структура сесквикарбоната натрия.

**Тема 9. Методы масс-спектрометрии (ПК-1)**

Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электростатическое неоднородное поле, химическая ионизация.

Ионный ток и сечение ионизации. Потенциалы появления ионов.

Типы ионов в масс-спек­трометрах: молекулярные, осколочные, метастабильные, перегруппировочные, многозарядные и отрицательные.

Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса.

 Применение масс-спектрометрии для идентификации веществ.

Тер­модинамические исследования в масс-спектрометрии.

Определение теплоты сублимации веществ, теплоты реакции и константы равновесия. Проблема расшифровки масс-спектра.

**Тема 10. Методы рентгеновской и фотоэлектронной (ФЭС) спектроскопии (ПК-5)**

Схема возникновения фо­тоэлектронной эмиссии, рентгеновского поглоще­ния, флуоресценции и Оже-электронов.

 Химический сдвиг в фотоэлектронной спектроскопии и его интерпретация.

 Параметры и структура фо­тоэлектронных спектров (ФЭС).

Сравнение метода ФЭС и рентгеновской спектроскопии.

Струк­турно-аналитическое применение методов фотоэлектронной спектро­скопии в химии. Определение химических элементов и энергий связи электронов на внешних и внутренних оболоч­ках атомов.

Техника и методика эксперимента. Рентгено-флуоресцентные спектрометры.

**Тема 11. Методы исследования оптически активных веществ (ПК-1)**

**Дисперсия оптического вращения.**

Круговая поляризация луча света.

 Квантово-механическое рассмотрение оптической активности и спиральная модель молекулы.

Эффект Коттона.

 Применение к изучению строения молекул оптически активных веществ. Правило окта­нов.

**Оптический круговой дихроизм.**

Эллиптическая поляризация света.

Зависимость оптического кругового дих­роизма от длины волны.

Схема измерений кругового дихроизма.

Область при­менения в стереохимии и электронном строе­нии оптически активных веществ.

* 1. **Методические материалы, определяющие процедуры оценивания.**
1. Положение «О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в ННГУ», утверждённое приказом ректора ННГУ от 13.02.2014 г. № 55-ОД.
2. Положение о фонде оценочных средств, утверждённое приказом ректора ННГУ от 10.06.2015 г. № 247-ОД
3. **Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля) «Физические методы исследования»**

Теоретическая подготовка к промежуточной аттестации может осуществляться по следующим литературным источникам:

**7.1. Основная литература:**

1. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе [Электронный ресурс]: издание второе, переработанное и дополненное. Учебное пособие/ Н.Г. Ярышев [и др.].— Электрон. текстовые данные.— М.: Прометей, 2015.— 196 c.

Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/58227>

1. Атомная физика: учебник и практикум для академического бакалавриата / В.П. Милантьев. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Издательство Юрайт, 2017. – 415 с. – Серия: Бакалавр. Академический курс.

Режим доступа: <https://biblio-online.ru/viewer/B8A5CD56-861F-4E07-8688-3E1530FF86E3#page/2>

1. Устынюк Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс) [Электронный ресурс]/ Устынюк Ю.А.— Электрон. текстовые данные.— М.: Техносфера, 2016.— 292 c.

Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/58860>

**7.2. Дополнительная литература:**

1. Пахомов Л.Г., Кирьянов К.В., Князев А.В. Физические методы в химических исследованиях. Учеб. пособие. Нижний Новгород .: Изд-во ННГУ. 2007. 286 с.

2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир. 2006. 683 с.

3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высш. шк. 2002. 366 с.

4. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М.: Высш. шк. 1989. 288 с.

1. Драго. Р. Физические методы в химии. М.: Мир. 1981. Т. 1. 422 с. Т. 2. 456 с.
2. Смит А. Прикладная *ИК-* спектроскопия. М.: Мир. 1982. 328 с.
3. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия. М.: Изд-во МГУ. 1980. 272 с.
4. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии М.:Мир. 1985.384 с.
5. Вукс М.Ф. Электрические и оптические свойства молекул и конденсированных сред. Учеб. пособие. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та. 1984. 334 с.
6. Горохов Л.И. Масс-спектрометрия в неорганической химии. М.: Знание.1984. 254 с.
7. Терентьев П.Б. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Высшая школа. 1979. 321 с.
8. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во Моск. ун-та. 1986. 232 с.
9. Ковба Л.М. Рентгенография в неорганической химии. М.: Изд-во МГУ. 1991.256 с.

**7.3 Рекомендуемая литература:**

1. Вюртц Дж., Болтон Дж.Теория и практика приложения метода ЭПР. М.: Мир.1975. 374 с.
2. Эткинс П., Саймоне М. Спектры ЭПР и строение неорганических радикалов М: Мир. 1970. 310 с.
3. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР. Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск. ун-та. 1981.279 с.
4. Гюнтер X. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир. 1984. 478 с.
5. Семин Г.К., Бабушкина Т.А., Якобсон Г.Г. Применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л.: Химия. 1972. 536 с.
6. Вертхейм Г. Эффект Мессбауэра. М.: Мир. 1966. 241 с.
7. Грознер У. Мессбауэровская спектроскопия. М.: Мир. 1983 256 с.
8. Гольданский В.Н. Эффект Мессбауэра и его применение в химии. М.: АН СССР. 1963.351с.
9. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Изд-во Моск. ун-та. 1987. 204 с.
10. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул. М.: Мир. 1963. 590 с.
11. БелламиЛ. Новые данные по инфракрасным спектрам сложных молекул.М.:Мир.1971.318 с.
12. Кесслер И. Методы инфракрасной спектроскопии в химическом анализе. М.: Мир. 1964.
13. Коптев Г.С., Пентин Ю.А.Расчет колебаний молекул.М.: Изд-во Моск.ун-та.1977.207 с.
14. Вукс М.Ф. Электрические и оптические свойства молекул и конденсированных сред. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та. 1984. 334 с.
15. Накамото К. ИК- спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. М.: Мир. 1991. 536 с.
16. Нефедов В.И., Бовина В.И. Электронная структура химических соедине­ний. М.: Наука. 1987. 346 с.

18. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л-д.:Химия. 1985.247 с.

1. Уитли П. Определение молекулярной структуры. М.: Мир. 1970. 296 с.
2. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач. М.: Химия. 1985. 232 с.
3. Толмачев В.Н. Электронные спектры поглощения органических соединений и их измерение. Харьков.: Изд-во Харьков. Гос.ун-та. 1974. 160 с.
4. Сысоев А.А. Чупакин М.С.Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат.1977. 254 с.
5. Терентьев П.Б. Масс-спектрометрия в органической химии. М.:Высш. шк. 1979. 254 с.
6. Зенкевич И.Г., Иоффе Б.В. Интерпретация масс-спектров органическихсоединений. Л.: Химия. 1986. 174 с.
7. Вульфсон Н.С., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектрометрия органиче­ских соединений. М.: Химия. 1986. 311с.
8. Порай-Кошиц М.А.Основы структурного анализа химических соединений.М.: Высш. шк.1982.152 с.
9. Бокий Г.Б. Кристаллохимия М.: Наука. 1971. 400 с.
10. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3 т. М.: Мир. 1987-1988. Т. 1,2,3.
11. Минкин В.И., Осипов О.А., Жданов Ю.А. Дипольные моменты в органической химии. Л.: Химия. 1968. 246 с.

30. Верещагин А.Н. Поляризуемость молекул. М.: Наука. 1980.177 с.

31. Вилков Л.В., Мастрюков B.C., Садова Н.И. Определение геометрического строения свободных молекул. Л.: Химия. 1978.224 с.

**7.4 Интернет-ресурсы:**

<http://www.cryst.ehu.es/>

<http://www.crystallography.net/cod/>

<https://www.dmoz.org//Science/Chemistry/Nuclear_Magnetic_Resonance/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

<http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de/>

<http://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi>

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии на сайтах издательств «Юрайт» (<http://www.urait.ru/>) и «ЭБС IPRbooks» (<http://www.iprbookshop.ru/>), доступ к которой предоставлен студентам. Сайты издательств содержат произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонды библиотек сформированы с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов.

**8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Лекционная (вместимость 200 человек) и семинарская (вместимость 40 человек) аудитории, оборудованные мультимедийным проектором, ноутбуком и выходом в сеть Интернет, а также доской и мелом (для разбора частных вопросов и детализации теоретических аспектов дисциплины, а также решения практических задач).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций и ПрООП ВПО по направлению подготовки 04.03.01 «Химия».

Автор (ы)

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_А.В. Князев

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Е.В. Сулейманов

к.х.н. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Е.Н. Буланов

Рецензент (ы)

к.х.н. с.н.с. ФГУП "ФНПЦ

НИИИС им. Ю.Е. Седакова"\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_А.А. Сазонов

Заведующий кафедрой,

д.х.н., проф. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Е.В. Сулейманов

Программа одобрена на заседании методической комиссии химического факультета

от 24 мая 2018 года, протокол № 11.