

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Кубанский государственный университет»

Факультет химии и высоких технологий

Кафедра общей, неорганической химии и информационно-вычислительных
технологий в химии



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ОД.2 СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) 02.00.01 Неорганическая химия

Форма обучения очная/заочная

Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ОД.2 «Современные методы исследования неорганических веществ» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 №869 по направлению подготовки: 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) и учебного плана основной образовательной программы.

Рабочую программу составил:

д.х.н., проф. Буков Н.Н.



Ответственный за направление
подготовки 04.06.01 Химические науки
профиль 02.00.01 Неорганическая химия,
д.х.н., профессор Буков Н.Н.



«28» 04 2018 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии

«28» 04 2018 г., протокол № 6

Заведующий кафедрой общей,
неорганической химии и ИВТ в химии
д.х.н., профессор Буков Н.Н.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета

«15» 05 2018 г., протокол № 4

Председатель УМК факультета
к.х.н., доцент, Стороженко Т. П.



Зав. Отделом аспирантуры
к.ф.-м.н., доцент Строганова Е.В.



1 Цели и задачи изучения дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ».

1.1 Цель освоения дисциплины.

Углубленное изучение аспирантами современных физических методов исследования структуры и свойств неорганических веществ

1.2 Задачи дисциплины.

– углубить теоретические знания о современных физических методах исследования структуры и свойств неорганических веществ;

– познакомить аспирантов с современными экспериментальными методами и приборами, используемыми в современной неорганической химии

– сформировать умение выбирать и использовать на практике методы исследования неорганических веществ.

1.3 Место дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ» в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современные методы исследования неорганических веществ» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Современные методы исследования неорганических веществ», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование компетенций ОПК-1, ОПК-2, ПК-2.

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	теоретические основы современных методов исследования в неорганической и координационной химии	самостоятельно выбирать, осваивать и применять современные методы исследования сообразно поставленной задаче с учетом их точности, чувствительности, стоимости и доступности	навыками планирования, постановки и выполнения экспериментов для синтеза и изучения неорганических веществ
2.	ОПК-2	Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	основные требования к измерительному оборудованию, используемому в ходе выполнения исследовательских работ в выбранной области	подбирать оборудование, необходимое для выполнения научно-исследовательских задач из имеющегося на рынке и составлять техническое задание для его приобретения согласно действующего	навыками планирования и обеспечения коллектива необходимыми материально-техническими ресурсами (измерительным оборудованием, реактивами, оргтехникой и т.д.) для выполнения

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
				законодательства	запланированных работ
3.	ПК-1	Готовность использовать на практике основные принципы, теории и концепции современной неорганической химии	принципы физических методов исследования для изучения структуры и свойств неорганических соединений	пользоваться учебной, научной, научно-популярной литературой, сетью Интернет для профессиональной деятельности; проводить статистическую обработку экспериментальных данных; выявлять причинно-следственные связи «структура-свойства» для неорганических веществ	основными понятиями и терминологией в области неорганических материалов; методиками измерения физико-химических характеристик неорганических материалов

2. Структура и содержание дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ»..

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ.

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач.ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице

Очная форма обучения

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры	
		2	3
Аудиторные занятия (всего)	66	36	30
В том числе:			
Занятия лекционного типа	16	8	8
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	20	10	10
Лабораторные занятия	30	18	12
Самостоятельная работа (всего)	114	36	78
В том числе:			
Проработка учебного (теоретического) материала	87	36	51
Подготовка к текущему контролю	27		27
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	зачет, экзамен	зачет	экзамен
Общая трудоемкость час	180	72	108
зач. ед.	5	2	3

Заочная форма обучения

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры	
		6	7
Аудиторные занятия (всего)	34	22	12
В том числе:			
Занятия лекционного типа	8	4	4
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	6	6	
Лабораторные занятия	20	12	8
Самостоятельная работа (всего)	146	68	78
В том числе:			
Проработка учебного (теоретического) материала	119	68	51
Подготовка к текущему контролю	27		27
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	зачет, экзамен	зачет	экзамен
Общая трудоемкость час	180	90	90
зач. ед.	5	2,5	2,5

2.2 Структура дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ»:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.
Разделы дисциплины, изучаемые в 2 семестре (*очная форма*)

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Основные понятия общей теории измерений	10	2	2	-	6
2.	Физические основы молекулярной спектроскопии	14	2	2	4	6
3.	Симметрия молекул и основы теории групп	16	2	2	4	8
4.	Квантово-механические модели молекул	14	-	2	4	8
5.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	18	2	2	6	8
	<i>Итого по дисциплине:</i>	72	8	10	18	36

Разделы дисциплины, изучаемые в 3 семестре (*очная форма*)

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
6.	Колебательная спектроскопия	18	2	2	4	10
7.	Электронная спектроскопия	18	2	2	4	10
8.	Радиоспектроскопия	14	2	2	-	10
9.	Масс-спектрометрия	14	2	2	-	10
10.	Совместное использование спектральных методов исследования	17	-	2	4	11
	Контроль	27				27
	<i>Итого по дисциплине:</i>	108	8	10	12	78

Разделы дисциплины, изучаемые в 6 семестре (заочная форма)

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Основные понятия общей теории измерений и физические основы молекулярной спектроскопии	42	2	2	4	34
2.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	48	2	4	8	34
<i>Итого по дисциплине:</i>		90	4	6	12	68

Разделы дисциплины, изучаемые в 7 семестре (заочная форма)

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
3.	Оптические методы молекулярной спектроскопии	23	2	-	4	17
4.	Методы радиоспектроскопии.	19	2	-	-	17
5.	Совместное использование спектральных методов исследования	21	-	-	4	17
Контроль		27		-		27
<i>Итого по дисциплине:</i>		90	4	-	8	78

2.3 Содержание разделов дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ»:

2.3.1 Занятия лекционного типа.

Очная форма

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля*
1	2	3	4
1.	Основные понятия общей теории измерений	Формально-логические основания измерения как процесса познания. Понятия, связанные с физическими величинами. Измерение как процесс познания. Термины и определения для физических величин. Основное уравнение измерения. Группы физических величин. Разновидности и характеристики измерений. Методы измерений. Виды измерений по условиям, определяющим точность результата. Абсолютные и относительные измерения. Инструментальные и органолептические измерения. Понятие о средствах измерений. Характеристики измерений.	К
2.	Физические основы молекулярной спектроскопии	Излучение и происхождение спектров. Виды излучения и его характеристики. Классический и квантовомеханический подходы к объяснению	К, ЛР

		спектров. Принципы классической теории испускания, поглощения и рассеяния излучения. Квантовомеханические основы происхождения спектров. Принципиальная схема спектрального прибора. Техника эксперимента. Фурье-спектроскопия. Вынужденное излучение. Лазеры.	
3.	Симметрия молекул и основы теории групп	Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Определение группы. Представления групп и характеры представлений. Прямое произведение представлений. Электрические дипольные моменты, поляризуемость и симметрия молекул.	К, ЛР
4.	Квантово-механические модели молекул (самостоятельно)	Операторы, свойства операторов. Волновая функция. Операторы квантовой механики молекул. Уравнение Шрёдингера. Приближение Борна—Оппенгеймера. Симметрия гамильтониана.	К, ЛР
5.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	Неэмпирические методы: Метод Хартри — Фока, Базисные наборы функций, . Учет электронной корреляции, Практические квантовомеханические расчеты. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы.	К, ЛР
6.	Колебательная спектроскопия	ИК-Спектры поглощения двухатомных молекул. Правила отбора. Колебательно-вращательный ИК-спектр двухатомной молекулы. Колебания многоатомных молекул. Правила отбора. Вращательная структура ИК-спектров многоатомных молекул. Применения ИК-спектроскопии. Модель КР. Колебательные спектры КР, правила отбора. Поляризация в спектрах КР. Резонансные спектры КР. Применения метода КР. Определение структуры молекулы. Использование колебательного спектра для решения структурных задач. Использование фундаментальных частот для расчета термодинамических функций вещества.	К, ЛР
7.	Электронная спектроскопия	Электронные состояния молекул. Электронные переходы. Вероятность и правила отбора переходов. Возбужденные состояния и спектры люминесценции. Применение методов электронной спектроскопии. Техника УФ-спектроскопии. Электронная структура и спектры ионов переходных металлов. Электронные состояния свободных ионов. Кристаллические поля. Эффект Яна-Теллера. Параметры химического связывания, получаемые из спектров. Модель углового перекрытия. Полосы переноса заряда. Фотохимические реакции.	К, ЛР
8.	Радиоспектроскопия	Методы радиоспектроскопии магнитного резонанса. Представление о магнитном резонансе. Спектроскопия ЯМР. Принципы и условия ЯМР. Реализация условий ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность. Спектры ЯМР парамагнитных	К

		<p>комплексов ионов переходных металлов. Применение спектроскопии ЯМР. Техника и методики спектроскопии ЯМР.</p> <p>Спектроскопия ЭПР. Теоретические основы и условия ЭПР. Параметры и структура спектров ЭПР. Спектры ЭПР комплексов ионов переходных металлов.</p> <p>Применение спектроскопии ЭПР. Техника и методики спектроскопии ЭПР.</p> <p>Множественный магнитный резонанс и поляризация спинов. Двойной ЯМР (ИНДОР). Другие методы физической поляризации ядерных и электронных спинов (ЭНДОР и ЭЛДОР). Химическая поляризация ядер и электронов.</p>	
9.	Масс-спектрометрия	<p>Физические основы процесса масс-спектрометрического распада. Электронный удар или электронная ионизация. Метастабильные ионы.</p> <p>Теория масс-спектрометрического распада.</p> <p>Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Стабильность ионов и нейтральных частиц.</p> <p>Правило степеней свободы. Прочность химических связей. Структурные и стереохимические факторы.</p> <p>Молекулярный ион. Определение молекулярных масс; метод ионизации полем. Расчет теплот сублимации.</p> <p>Потенциалы возникновения и потенциалы ионизации.</p>	К
10.	Совместное использование спектральных методов исследования (самостоятельно)	<p>Преимущества и недостатки отдельных видов спектрального анализа. Стратегия совместного применения различных видов спектроскопии при идентификации неизвестного соединения.</p> <p>Предварительные исследования. Определение молекулярной массы и брутто-формулы.</p> <p>Представление результатов исследования неизвестного вещества по формам отчета №№ 1-3.</p> <p>Формулировка выводов.</p>	К, ЛР

Заочная форма

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля*
1	2	3	4
1.	Основные понятия общей теории измерений и физические основы молекулярной спектроскопии	<p>Формально-логические основания измерения как процесса познания. Понятия, связанные с физическими величинами. Измерение как процесс познания.</p> <p>Термины и определения для физических величин. Основное уравнение измерения. Группы физических величин. Разновидности и характеристики измерений. Методы измерений. Прямые, косвенные, совокупные и совместные измерения. Статические и динамические измерения. Виды измерений по условиям, определяющим точность результата. Абсолютные и относительные измерения. Инструментальные и органолептические измерения. Понятие о средствах измерений. Характеристики измерений. Методы</p>	К, ЛР

		измерений. Излучение и происхождение спектров. Виды излучения и его характеристики. Принципы классической теории испускания, поглощения и рассеяния излучения. Квантовомеханические основы происхождения спектров. Принципиальная схема спектрального прибора. Техника эксперимента. Фурье-спектроскопия.	
2.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	Неэмпирические методы: Метод Хартри —Фока, Базисные наборы функций, . Учет электронной корреляции, Практические квантовомеханические расчеты. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы.	К, ЛР
3.	Оптические методы молекулярной спектроскопии	Колебания многоатомных молекул. Правила отбора. Вращательная структура ИК-спектров многоатомных молекул. Применения ИК-спектроскопии. Колебательные спектры КР, правила отбора. Применения метода КР. Использование колебательного спектра для решения структурных задач. Использование фундаментальных частот для расчета термодинамических функций вещества. Электронные переходы. Вероятность и правила отбора переходов. Возбужденные состояния и спектры люминесценции. Применение методов электронной спектроскопии. Электронная структура и спектры ионов переходных металлов. Электронные состояния свободных ионов. Кристаллические поля. Эффект Яна-Теллера. Параметры химического связывания, получаемые из спектров. Модель углового перекрывания. Полосы переноса заряда.	ЛР
4.	Методы радиоспектроскопии.	Методы радиоспектроскопии магнитного резонанса. Спектроскопия ЯМР. Принципы и условия ЯМР. Реализация условий ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность. Применение спектроскопии ЯМР. Спектроскопия ЭПР. Теоретические основы и условия ЭПР. Параметры и структура спектров ЭПР. Применение спектроскопии ЭПР. Множественный магнитный резонанс и поляризация спинов. Двойной ЯМР (ИНДОР). Другие методы физической поляризации ядерных и электронных спинов (ЭНДОР и ЭЛДОР). Химическая поляризация ядер и электронов.	УО
5.	Совместное использование спектральных методов исследования (самостоятельно)	Преимущества и недостатки отдельных видов спектрального анализа. Стратегия совместного применения различных видов спектроскопии при идентификации неизвестного соединения. Предварительные исследования. Определение молекулярной массы и брутто-формулы. Представление результатов исследования неизвестного вещества. Формулировка выводов.	ЛР

2.3.2 Занятия семинарского типа.

Очная форма

№	Наименование раздела	Тематика практических занятий (семинаров)	Форма текущего контроля*
1	2	3	4
1.	Основные понятия общей теории измерений	Идентификация веществ. Установление химического строения. Определение термодинамических характеристик веществ и реакций.	К
2.	Физические основы молекулярной спектроскопии	Излучение и происхождение спектров. Виды излучения и его характеристики. Принципы классической теории испускания, поглощения и рассеяния излучения. Квантовомеханические основы происхождения спектров. Принципиальная схема спектрального прибора. Техника эксперимента. Фурье-спектроскопия.	К
3.	Симметрия молекул и основы теории групп	Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Определение группы. Представления групп и характеры представлений. Прямое произведение представлений. Электрические дипольные моменты, поляризуемость и симметрия молекул.	К
4.	Квантово-механические модели молекул	Операторы, свойства операторов. Волновая функция. Операторы квантовой механики молекул. Уравнение Шрёдингера. Приближение Борна—Оппенгеймера. Симметрия гамильтониана.	К
5.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	Неэмпирические методы: Метод Хартри — Фока, Базисные наборы функций. Учет электронной корреляции, Практические квантовомеханические расчеты. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы.	К
6.	Колебательная спектроскопия	Классическое рассмотрение колебаний простых многоатомных молекул. Введение естественных координат. Учет симметрии. Определение частот колебаний (решение уравнений первого и второго порядков для трехатомных молекул). Определение симметрии молекулы по данным ИК и КР спектров. Использование групповых частот в структурном анализе.	К
7.	Электронная спектроскопия	Классификация и отнесение электронных переходов и соответствующих полос в УФ и видимых спектрах. Применение электронных спектров. Применение методов абсорбционной ИК и УФ спектроскопии в количественном анализе, исследовании равновесий и кинетики реакций.	К
8.	Радиоспектроскопия	Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР. Динамический ЯМР, изучение обменных и других быстро протекающих процессов. Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций методом ЭПР.	К

9.	Масс-спектрометрия	Физические основы процесса масс-спектрометрического распада. Электронный удар или электронная ионизация. Метастабильные ионы. Теория масс-спектроскопического распада. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Молекулярный ион. Определение молекулярных масс; метод ионизации полем. Расчет теплот сублимации.	К
10.	Совместное использование спектральных методов исследования	Преимущества и недостатки отдельных видов спектрального анализа. Стратегия совместного применения различных видов спектроскопии при идентификации неизвестного соединения. Представление результатов исследования неизвестного вещества. Формулировка выводов.	К

Заочная форма

№	Наименование раздела	Тематика практических занятий (семинаров)	Форма текущего контроля*
1	2	3	4
1.	Основные понятия общей теории измерений и физические основы молекулярной спектроскопии	Идентификация веществ. Установление химического строения. Определение термодинамических характеристик веществ и реакций. Излучение и происхождение спектров. Виды излучения и его характеристики. Принципы классической теории испускания, поглощения и рассеяния излучения. Квантовомеханические основы происхождения спектров.	К
2.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	Неэмпирические методы: Метод Хартри — Фока, Базисные наборы функций. Учет электронной корреляции, Практические квантовомеханические расчеты. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы.	К

2.3.3 Лабораторные занятия.

Очная форма

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля*
1	3	4
1.	Физические основы молекулярной спектроскопии	ЛР
2.	Симметрия молекул и основы теории групп	ЛР
3.	Квантово-механические модели молекул	ЛР
4.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	ЛР
5.	Колебательная спектроскопия	ЛР
6.	Электронная спектроскопия	ЛР
7.	Совместное использование спектральных методов исследования	ЛР

Заочная форма

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля*
1	3	4
1.	Основные понятия общей теории измерений и физические основы молекулярной спектроскопии	ЛР
2.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	ЛР
3.	Оптические методы молекулярной спектроскопии	ЛР
4.	Совместное использование спектральных методов исследования	ЛР

*- *Формы текущего контроля: защита лабораторной работы (ЛР), коллоквиум (К), устный опрос (УО).*

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Современные методы исследования неорганических веществ».

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1.	Основные понятия общей теории измерений	Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М: Мир, 2009. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981
2.	Физические основы молекулярной спектроскопии	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNA_YSPEKTROSKOPIY_6.pdf
3.	Симметрия молекул и основы теории групп	Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981 Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир. 1989. 486 с.
4.	Квантово-механические модели молекул	Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981
5.	Вычислительные методы молекулярной спектроскопии	Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981 Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир. 1989. 486 с.
6.	Колебательная спектроскопия.	Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNA_YSPEKTROSKOPIY_4.pdf Буков Н.Н., Костырина Т.В., Абрамов Д.Е., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 2. Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIIE_SPEKTRI_3.pdf
7.	Электронная спектроскопия.	Буков Н.Н., Павлов П.А., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 1. Электронные спектры. Уч. пособие, КубГУ.

		http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf
8.	Радиоспектроскопия.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3: Спектроскопия ЯМР (H^1). – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROSKOPIYYMR_5.pdf
9.	Масс-спектрометрия.	Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений: учебное пособие М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 548 с.
10.	Совместное применение спектральных методов.	Буков Н.Н., Буикликий В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001 Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир. 1989. 486 с.

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в форме электронного документа,

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа,

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии.

Образовательные технологии, используемые при реализации различных видов учебной работы: активные и интерактивные формы проведения занятий - деловые и ролевые игры, разбор практических задач и кейсов, компьютерные симуляции, психологические и иные тренинги проводятся индивидуально с каждым обучаемым в рамках темы выполняемого диссертационного исследования.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля прилагается.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Вопросы к зачету

1. Общая характеристика методов молекулярной спектроскопии.
2. Классификация спектральных методов исследования.
3. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом.
4. Основные применения спектральных методов.
5. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов в спектроскопии.
6. Правила отбора спектральных полос поглощения.
7. Энергетические состояния атомов и молекул. Термы.
8. Полуэмпирические методы в спектроскопии.
9. Основные спектральные методы расчета констант реакций.
10. Прямая и обратная спектральная задача.
11. Виды спектральных измерений по условиям, определяющим точность результата.
12. Химические процессы, влияющие на ширину спектральной линии.
13. Энергетические уровни двухатомной молекулы.
14. Виды спектроскопии по свойствам излучения.
15. Естественные пределы спектральных измерений.
16. Спектральные особенности ионов переходных металлов.
17. Техника эксперимента в электронной спектроскопии.
18. Колебательная (ИК-, КР-) спектроскопия.
19. Концепция групповых частот в колебательной спектроскопии
20. Симметрия молекулярных колебаний
21. Методика эксперимента в колебательной спектроскопии.
22. Различия в ИК- и КР-спектроскопии.
23. Нормальные колебания многоатомных молекул.
24. Магнитные свойства ядер. Переходы в ЯМР.
25. Моделирование спектров ЯМР ^1H по уравнениям Шулери
26. ЭПР-спектроскопия. g-фактор.
27. Техника эксперимента в радиоспектроскопии.
28. Масс-спектроскопия.
29. Процессы фрагментации в масс-спектроскопии.
30. Интерпретация масс-спектров.
31. Хромато-масс-спектрометрия.

Вопросы экзамена охватывают все темы выше отмеченных разделов и в качестве примера приводится типовой пример билета.



Федеральное государственное образовательное учреждение
высшего образования
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Кафедра общей, неорганической химии и ИВТ в химии

Экзаменационный Билет № __

*дисциплина «Современные методы исследования неорганических веществ»
по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия*

1. Принципы классической теории испускания, поглощения и рассеяния излучения.
2. Электронная структура и спектры ионов переходных металлов.
3. Стратегия совместного применения различных видов спектроскопии при идентификации неизвестного соединения.

Заведующий кафедрой

Н.Н. Буков

4.3. Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала:

- обучаемый имеет определенное представление о внешних свойствах и признаках изучаемых предметов и явлений, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (неудовл., незачтено);

- обучаемый имеет четкие представления об изучаемых предметах и явлениях, понимает их сущность, однако обнаруживает затруднение в их воспроизведении и применении на практике, что приводит к необходимости уточняющих и дополнительных вопросов в процессе проверки (удовл.);

- обучаемый достаточно полно осмыслил материал, с пониманием формулирует соответствующие понятия (теоретические положения), хотя при их обосновании и воспроизведении нуждается в некоторых уточнениях, обнаруживает умение применять усвоенные знания на практике, допуская мелкие, несущественные недочеты в письменных работах (хор);

- высший уровень владения материалом состоит в его глубоком осмыслении на понятийном уровне, в умении свободно и логично воспроизводить и обосновывать содержащиеся в нем положения примерами и фактами, а также не допускать ошибок при выполнении письменных и практических работ, проявлять самостоятельность и элементы творчества (отл).

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ».

5.1 Основная литература:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М: Мир, 2009.
2. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир, 2008.
3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, 2006.
4. Физические методы исследования неорганических веществ. Под ред. Никольского А.Б. – М.: Академия, 2006.
5. Беккер. Ю. Спектроскопия. – М.: Техносфера, 2009. – 527 с.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

5.2 Дополнительная литература:

1. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
2. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981.
3. Бенуэл К. основы молекулярной спектроскопии. – М.:, 1985.

4. **Ельяшевич, Михаил Александрович.** Атомная и молекулярная спектроскопия / Ельяшевич, Михаил Александрович; Гл. ред. Е. Кудряшова. - 2-е изд. - М.: Эдиториал УРСС, 2001. - 894с.
5. **Купцов, Альберт Харисович.** Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров: [справочник] / Купцов, Альберт Харисович, Г. Н. Жижин ; А. Х. Купцов, Г. Н. Жижин. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. - 582 с.
6. **Векшин, Н. Л.** Флуоресцентная спектроскопия биополимеров: [краткий учебный курс] / Н. Л. Векшин; Н. Л. Векшин. - Пушино: [Фотон-век], 2008. - 168 с.
7. **Беккер, Юрген.** Спектроскопия / Беккер, Юрген; Ю. Беккер; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с.
8. **Шмидт, Вернер.** Оптическая спектроскопия для химиков и биологов / Шмидт, Вернер; В. Шмидт; пер. с англ. Н. П. Ивановской; под ред. С. В. Савилова. - М.: Техносфера, 2007. - 367 с.
9. **Соболев, Валентин Викторович.** Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. 1: Введение в теорию / Соболев, Валентин Викторович; В. В. Соболев. - Москва; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2012. - 583 с.
10. **Демтредер, Вольфганг.** Современная лазерная спектроскопия : [учебное пособие] / Демтредер, Вольфганг; В. Демтредер; пер. с англ. М. В. Рябининой, Л. А. Мельникова, В. Л. Дербова; под ред. Л. А. Мельникова. - Долгопрудный: Интеллект, 2014. - 1071 с.
11. **Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков:** [учебник для химических специальностей вузов] / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - [Москва]: [Международный благотворительный фонд "Научное Partnership"]; ICSPF Press, 2011. - 694 с.

5.3. Периодические издания:

Периодические издания: журналы – «Пластические массы», «Полимерные материалы», «Российский химический журнал», «Химическая промышленность», «Успехи химии», «Композитный мир», материалы международной конференции («Композит-2001, 2007, 2010») и многие другие.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ»..

1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.ihtik.lib.ru/>
3. <http://www.y10k.ru/books/>
4. <http://www.iupac.org/>
5. <http://www.anchem.ru/literature/>
6. <http://www.sciencedirect.com>
7. <http://chemteq.ru/lib/book>
8. <http://www.chem.msu.su/rus>
9. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
10. <http://www.elsevier.com/>
11. <http://www.uspkhim.ru/>
12. <http://www.strf.ru/database.aspx>

а также, интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.

Зарубежные ведущие научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.

Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины «Современные методы исследования неорганических веществ».

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
11	Введение	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf
12	Электронная спектроскопия.	Буков Н.Н., Павлов П.А., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 1. Электронные спектры. Уч. пособие, КубГУ. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf
13	Колебательная спектроскопия.	Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNAYSPEKTROSKOPIY_4.pdf Буков Н.Н., Костырина Т.В., Абрамов Д.Е., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 2. Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIESPEKTRI_3.pdf
14	Радиоспектроскопия.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3: Спектроскопия ЯМР (H^1). – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROSKOPIYYM R_5.pdf
15	Масс-спектрометрия.	Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений: учебное пособие М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 548 с.
16	Совместное применение спектральных методов.	Буков Н.Н., Буикликий В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Современные методы исследования неорганических веществ».

Информационные технологии - не предусмотрены

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения.

– Программы, демонстрации видео материалов (проигрыватель «Windows Media Player»).

– Программы для демонстрации и создания презентаций («Microsoft Power Point»).

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Справочно-правовая система «Консультант Плюс» (<http://www.consultant.ru>)

2. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU (<http://www.elibrary.ru/>)

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).

№№	Перечень лабораторий	№ аудиторий	Перечень лабораторного оборудования *	Перечень и результаты научно-исследовательских разработок, осуществляемых на базе лаборатории *
1.	Лаборатория спектроскопии координационных соединений	134 С	ИК-Фурье спектрометр VERTEX-70, спектрофотометр UV-VIS HITACHI U-3900, КР-спектрометр SPEX RAMALOG, длинноволновый ИК-фурье спектрометр ЛАФС-1000, компьютеры, анализатор жидкости Флюорат панорама -02.	Подготовка и проведение курсовых, выпускных бакалаврских, магистерских и аспирантских работ, научно-исследовательских работ бакалавров, магистров и аспирантов по химии координационных соединений
2.	Лаборатория синтеза координационных соединений	136 С	установка для осаждения тонких пленок CCR Corra Cube ISSA, сушильный шкаф СШУ, дозаторы автоматические, плитка электрическая, мешалка магнитная, весы аналитические Shinko HTR-220CE.	исследовательских работ бакалавров, магистров и аспирантов по химии координационных соединений
3.	Лаборатория физических методов исследования	136	ЭПР-спектрометр, ИК-спектрометр IR-70, плитки электрические, компьютеры, мешалка магнитная, весы аналитические ВЛР-200.	Проведение исследований координационных и композитных материалов
4.	Лаборатория электрохимического синтеза	422 С	программатор импульсного тока ВК1760А, вакуумный сушильный шкаф шсв-65/3.5.	Подготовка и проведение курсовых, выпускных

5.	Лаборатория неорганического синтеза	424 С	весы аналитические Adventurer Ohaus, мешалка магнитная с подогревом MM-5, плитки электрические, холодильник Candy.	бакалаврских, магистерских и аспирантских работ, научно-исследовательских работ бакалавров, магистров и аспирантов по химии координационных соединений
6	Лаборатория химии координационных соединений	426 С	Источник тока, сушильный шкаф, рН метр-иономер «Мультитест 111-1», станция рабочая, потенциостат IPC FRA, мешалка магнитная Leki MS1.	
	Лаборатория бионеорганической химии	428 С	рабочая станция, источник тока СТ-562-М, спектрофотометр Leki SS 2110 UV, мешалка магнитная, дозатор капельный.	
	Лаборатория защитных покрытий	443 С	Прибор для определения прочности плёнок, «Константа У-1А», рабочая станция, сушильный шкаф ШС-80-01 СПУ, муфельный шкаф SNOL, весы теххимические Acom JW1, адгезиметр Posi-test AT-A, алмазный станок для резки высокопрочных композитных материалов.	Подготовка и проведение курсовых, выпускных бакалаврских, магистерских и аспирантских работ, научно-исследовательских работ бакалавров, магистров и аспирантов по химии координационных соединений и композитных материалов
	Лаборатория химической технологии и материаловедения	435 С	Спектрофотометр Leki SS 2107, Весы электронные Leki B 5002, рН метр, «Эксперт-001-1», мешалка магнитная с подогревом ПЭ- 6110, муфельная печь LOTP, встряхиватель ИКА С-MAG HS7, твердомер ТК-2М, центрифуга лабораторная ЦЕН-16, микроскоп металлографический Альтами.	
	Лаборатория композитных материалов	433 С	Абразиметр Taber Abraser, мешалка с подогревом, плитки электрические, весы аналитические ВЛР-200, мешалка магнитная, термостат водяной проточный.	

Также в КубГУ функционируют УНИК «Аналит» и Центр коллективного пользования «Диагностика структуры и свойств наноматериалов», в которых имеется уникальное высокотехнологичное современное оборудование, позволяющее выполнять научно-исследовательскую работу на высоком уровне: сканирующий электронный микроскоп с энергодисперсионной приставкой JSM 7500F, атомно-силовой сканирующий микроскоп JSPM 5400, ЭПР спектрометр JEOL FA-300, ЯМР спектрометр JNM ECA-400.