

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Кубанский государственный университет»  
Факультет химии и высоких технологий

# УТВЕРЖДАЮ

**Проректор по учебной работе, ка-  
честву образования – первый про-  
ректор**

Хагуров Т.А.

2018 E.

# РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

## Б1.В.08 «ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ»

Направление подготовки - 04.03.01 Химия

Направленность - аналитическая химия

## Программа подготовки – академическая

## Форма обучения - очная

## Квалификация выпускника - бакалавр

Краснодар 2018

**Рабочая программа дисциплины «Физические методы исследования»** составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 12.03.2015 № 210 по направлению подготовки 04.03.01 – Химия (уровень бакалавриата)

**Программу составил**

д.х.н., профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии Буков Н.Н.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры аналитической химии  
«19» 09 2018 г., протокол № 5

Заведующий кафедрой д.х.н., профессор Темердашев З.А.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры ОНХиИВТвХ  
«10» апреля 2018 г., протокол № 8

Заведующий кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий «20» апреля 2018 г., протокол № 5

Председатель УМК факультета доцент Стороженко Т.П.

Эксперты:

Петров Н.Н. Генеральный директор ООО «Интеллектуальные композиционные решения», кандидат химических наук, доцент

Исаев В.А. Зав. кафедрой теоретической физики и компьютерных технологий КубГУ, д-р физ.-мат. наук, доцент

# **1 Цели и задачи изучения дисциплины**

## **1.1 Цель дисциплины**

Преподавание курса «Физические методы исследования» имеет целью закрепить у студентов понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений, важнейших для химиков физических методов исследования химических соединений, освоение современного аппаратурного оснащения и закрепление навыков проведения эксперимента.

## **1.2 Задачи дисциплины**

- Изучение физической теории методов, схем и методик проведения эксперимента;
- Формирование представлений о возможностях использования современных физических методов для решения обратных задач в химии, т.е. определения искомых параметров химических объектов исследования;
- Анализ возможностей физических методов с точки зрения их теоретического и практического применения, в том числе в аналитической химии.

## **1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1 учебного плана. Данный курс опирается на знания по физике, математике (природа электромагнитного излучения, типы взаимодействия его с матрицей, техника спектрального эксперимента, приемы математического анализа). Для успешного применения ряда физических методов необходимо знание основ квантовой механики (основные определения и фундаментальные понятия, квантово-механическая теория строения молекул). Изложение материала о строении молекул предполагает наличие базовых знаний о современных вычислительных возможностях квантовой химии. Интенсивное внедрение в эксперимент вычислительной техники требует наличия у студентов навыков работы как со стандартными программными системами, широко используемыми в настоящее время для обработки экспериментальных данных, так и владения современным языком математической формализации тех физических задач, которые возникают при анализе спектральных данных.

Полученные студентами знания необходимы при изучении специальных курсов. Знания, приобретенные при освоении курса, могут быть использованы при решении различных задач специальных химических дисциплин.

Знания, приобретенные при освоении данного курса, будут использованы при решении структурных задач выпускных квалификационных работ по аналитической химии.

#### **1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Физические методы исследования», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций: ОПК-1, ПК-2 и ПК-5

№ п.п .	Ин-декс компе-петен-тии	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знатъ	уметь	владеТЬ
1.	ОПК-1	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	теоретические основы фундаментальных разделов химии	использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	методологией решения профессиональных задач
2	ПК-2	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	базовые приемы использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	применять данные физических методов исследования при проведении научных исследований	базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований
3	ПК-5	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования	применять современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования	методологией обработки результатов научных экспериментов физическими методами исследования

## **2. Структура и содержание дисциплины**

### **2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ**

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач.ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры		
		5		
<b>Контактная работа, в том числе:</b>	<b>80,2</b>	<b>80,2</b>		
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	<b>72</b>	<b>72</b>		
Занятия лекционного типа	36	36		
Лабораторные занятия	36	36		
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-		
<b>Иная контактная работа</b>	<b>8,2</b>	<b>8,2</b>		
Контроль самостоятельной работы (КСР)	8	8		
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	0,2		
<b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>	<b>63,8</b>	<b>63,8</b>		
Проработка учебного (теоретического) материала	47,8	47,8		
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций, докладов)	-	-		
Подготовка отчетов по лабораторным работам и их защите	16	16		
Подготовка к текущему контролю	-	-		
<b>Контроль:</b>	<b>-</b>	<b>-</b>		
Подготовка к экзамену	-	-		
<b>Общая трудоемкость</b>	<b>час</b>	<b>144</b>	<b>144</b>	
	<b>контактная работа</b>	<b>80,2</b>	<b>80,2</b>	
	<b>зач. ед</b>	<b>4</b>	<b>4</b>	

## 2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 5 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Всего	Количество часов			
			Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ЛР	ПР	СРС
1.	Общая характеристика физических методов исследования.	2,8	2	-	-	0,8
2.	Введение в спектроскопию	10	2	-	-	8
3.	Электронная спектроскопия	26	6	12	-	8
4.	Колебательная спектроскопия.	26	6	12	-	8
5.	Электронный парамагнитный резонанс	12	4	-	-	8
6.	Ядерный магнитный резонанс	12	4	-	-	8
7.	Масс-спектрометрия	16	4	4	-	8
8.	Другие физические методы исследования	11	4	-	-	7
9.	Совместное применение спектральных методов исследования	20	4	8	-	8
	<i>Всего:</i>		36	36		63,8

## 2.3 Содержание разделов дисциплины:

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

№ ра- з де- ла	Наименова- ние раздела	Содержание раздела		Фор- ма теку- ку- ще- го кон- тро- ля
		1	2	3
1	Общая характеристика физических методов исследования.	Физическая теория методов. Прямая и обратная задачи. Понятия корректной и некорректной постановки задач физических методов. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Возможности, области применения и интеграция физических методов исследования.	УО	
2	Введение в спектроскопию	Электронные состояния молекул, определение и основные характеристики. Волновая функция, энергия, вырожденность, мультиплетность, время жизни и заселённость электронных состояний. Колебательно-вращательная структура электронных состояний и электронно-колебательно-вращательные переходы в молекулах. Тонкая и сверхтонкая структура электронных спектров молекул. Принцип Франка-Кондона. Классификация и номенклатура электронных состояний и переходов между ними в двухатомных, многоатомных линейных и нелинейных молекулах. Классификация по Каща и Малликену, концепция хромофорных и ауксохромных групп, переходы с переносом заряда.	К	
3	Электронная спектроскопия	Критерии отнесения полос поглощения к различны электронным переходам. Влияние эффектов сопряжения, пространственных эффектов и полярности растворителя на электронные спектры поглощения молекул. Эмпирические правила Вудворда-Физера. Квантовомеханическая вероятность электронно-колебательно-вращательных переходов и сила осциллятора.	К	

		Интенсивность полос поглощения различных электронных переходов. Правила отбора и нарушение запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, количественном и структурном видах анализа. Определение молекулярных постоянных двухатомных молекул. Специфика электронных спектров поглощения различных классов химических соединений. Техника и методы абсорбционной спектроскопии в видимой и ультрафиолетовой областях.	
4	Колебательная спектроскопия.	<p>Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация. Фундаментальные, обертонные и составные частоты. Инфракрасные (ИК) спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР). Правила отбора и интенсивность полос колебательных переходов в ИК-спектрах поглощения и в спектрах КР. Классический подход к решению прямой и обратной колебательных задач. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные и нормальные координаты молекул. Коэффициенты кинематического взаимодействия и силовые постоянные. Учёт симметрии молекул. Типы симметрии нормальных колебаний. Приводимые и неприводимые представления. Таблицы характеров не-приводимых представлений точечных групп симметрии и правила пользования ими при определении типов симметрии и активности нормальных колебаний молекул в спектрах ИК и КР. Характеристичность нормальных колебаний. Концепция групповых частот и её ограничения. Сопоставление ИК- и КР-спектров и выводы о симметрии молекул.</p> <p>Идентификация спектральных данных. Качественный и количественный анализ. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций. Методы и техника ИК- и КР-спектроскопии. Понятия о методах НПВО и МНПВО. Подготовка образцов для регистрации спектров.</p>	К
5	Электронный	Метод электронного парамагнитного резонанса	К

	парамагнитный резонанс	Спиновый и магнитный моменты электрона. Эффект Зеемана для неспаренного электрона. Элементарный магнитный резонанс. Основное уравнение ЭПР, правила отбора и условия получения спектров ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие и его проявление в спектре ЭПР. Приложение метода ЭПР в химии. Идентификация и определение концентрации парамагнитных молекул, изучение механизма и кинетики химических реакций.	
6	Ядерный магнитный резонанс	Ядерный спиновый и магнитный моменты. Магнитно активные ядра атомов химических элементов и их изотопов. Физические основы явления ЯМР. Снятие вырождения спиновых состояний ядер в постоянном магнитном поле, эффект Зеемана. Условия возникновения ЯМР. Заселённость энергетических уровней. Насыщение, релаксационные процессы, ширина сигнала в спектроскопии ЯМР. Влияние электронного окружения на результирующее магнитное поле, константы электронного экранирования ядер. Протонный магнитный резонанс, ЯМР $^{13}\text{C}$ и других ядер. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Шкалы химических сдвигов. Спин-спиновое взаимодействие ядер и его природа. Энергетические состояния систем взаимодействующих спинов и мультиплектические функции для описания этих систем. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности между сигналами спектра ЯМР и между компонентами в мультиплете сигнала, фундаментальное правило ЯМР-спектроскопии. Константы спин-спинового взаимодействия, их физический смысл, классификация и информативность. Техника и методы эксперимента. Применение метода ЯМР в химии. Структурный анализ. Изучение быстропротекающих процессов. Химическая поляризация ядер.	К
7	Масс-спектрометрия	Методы ионизации молекул. Электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация, комбинированные методы. Ионный ток и потенциал появления ионов. Принцип Франка-Кондона. Диссоциативная ионизация. Типы	К

		ионов в масс-спектрометрии. Принципы устройства масс-спектрометров. Применение масс-спектрометрии. Идентификация 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. Термодинамические исследования. Определение парциальных давлений компонентов газовой смеси. Определение теплоты сублимации, теплоты реакции и констант равновесия.	
8	Другие физические методы исследования	Понятие о спектрах флуоресценции и фосфоресценции. Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и оже-спектроскопии. Методы изучения поляризуемости молекул: дисперсия оптического вращения и оптический круговой дихроизм. Методы определения электрических дипольных моментов молекул. Методы определения геометрии молекул. Ядерный квадрупольный резонанс. Ядерный гамма-резонанс.	
9	Совместное применение спектральных методов исследования	Стратегия выбора конкретных видов физических методов исследования. Сопоставление экспериментальных результатов.	

### 2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятий семинарского типа по дисциплине не предусмотрено.

### 2.3.3 Лабораторные занятия

№	Тема	Час.
1.	Общие вопросы спектроскопии и техника безопасности при работе на современном спектральном оборудовании	2
2.	Запись спектров, классификация и отнесение электронных переходов и соответствующих полос поглощения в УФ и видимых спектрах	12

3.	Запись спектров, классификация и отнесение колебательных переходов в ИК и КР спектрах	12
4.	Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций методом ЭПР.	4
5.	Использование групповых частот в структурном анализе.	4
6.	Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР.	8
7.	Идентификация веществ по данным масс-спектроскопии.	12
8.	Комплексное применение методов спектроскопии в качественном и количественном анализе, исследовании равновесий и кинетики реакций.	4

ИТОГО: 54 ч.

### 2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Проведение курсовых работ по дисциплине – не предусмотрено

### 2.3.5 Примерная тематика КРС

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  $^1\text{H}$  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.

## **2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы		
		1	2	3
1.	Введение	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, <a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf</a>		
2.	Электронная спектроскопия.	Буков Н.Н., Павлов П.А., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 1. Электронные спектры. Уч. пособие, КубГУ. <a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf</a> Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. <a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf</a>		
3.	Колебательная спектроскопия.	Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, <a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNAYSPEKTROSKOPIY_4.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNAYSPEKTROSKOPIY_4.pdf</a> Буков Н.Н., Костырина Т.В., Абрамов Д.Е., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 2. Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, <a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIESPEKTRI_3.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIESPEKTRI_3.pdf</a>		
4.	Радиоспектроскопия.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В., Буйклиский В.Д. Физические методы исследования. Часть 3: Спектроскопия ЯМР ( $\text{H}^1$ ). – Краснодар: КубГУ, 2006.		

		<a href="http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROS_KOPIYYMR_5.pdf">http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROS_KOPIYYMR_5.pdf</a>
5.	Масс-спектрометрия.	Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений: учебное пособие М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 548 с.
6.	Совместное применение спектральных методов.	Буков Н.Н., Буиклисский В.Д., Панюшкин В.Т. Физические методы исследования координационных соединений редкоземельных элементов. Краснодар, КубГУ «Книга», 2001

### 3. Образовательные технологии

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
4	Л	электронные презентации	20
	ПР	-	
	ЛР	решение проблемных ситуаций в составе малых групп.	12
Итого:			32

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

Текущий контроль осуществляется в устной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и опроса. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 5 семестре.

#### Методические рекомендации к сдаче зачета

Студенты обязаны сдать зачет в соответствии с расписанием и учебным планом. Зачет является формой контроля усвоения студентом учебной программы по дисциплине или ее части, выполнения практических, контрольных, реферативных работ.

Результат сдачи зачета по прослушанному курсу должны оцениваться как итог деятельности студента в семестре, а именно - по посещаемости лекций, результатам работы на практических занятиях, выполнения самостоятельной работы. При этом допускается на очной форме обучения пропуск не более 20% занятий, с обязательной отработкой пропущенных семинаров. Студенты у которых количество пропусков превышает установленную норму, не выполнившие все виды работ и неудовлетворительно работавшие в течение семестра, проходят собеседование с преподавателем, который опрашивает студента на предмет выявления знания основных положений дисциплины.

**Требования к знаниям:** - бакалавр должен обладать базовыми и углубленными знаниями физических методов исследования; знать базовые приемы использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, принципы построения и функционирования измерительных устройств и систем в химии, а также современные компьютерные технологии при обработке данных физических методов исследования.

**Требования к характеристикам умений и владений** – бакалавр должен уметь применять данные физических методов исследования при проведении научных исследований, а также владеть методологией обработки результатов научных экспериментов физическими методами исследования.

**Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала**

- обучаемый имеет определенное представление о физических методах исследования, но не проявляет ихальной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**незачтено**);

- обучаемый имеет четкие представления о физических методах исследования, понимает их сущность, однако обнаруживает затруднение в их воспроизведении и применении на практике, что приводит к необходимости уточняющих и дополнительных вопросов в процессе проверки (**зачтено, удовл**);

- обучаемый достаточно полно осмыслил материал о физических методах исследования, 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 (**зачтено, хор**);

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

Студенты, успешно решившие задачи контрольных работ, аттестуются досрочно.

#### **4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации**

##### **Вопросы для подготовки 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. Переходы в атомах и молекулах. Правила отбора.
8. Энергетические состояния атомов и молекул. Термы.
9. Полуэмпирические методы в спектроскопии.
10. Основные спектральные методы расчета констант реакций.
11. Прямая и обратная спектральная задача.
12. Основные характеристики уровней энергии.
13. Законы светопоглощения.
14. Вероятности переходов и правила отбора.
15. Симметрия атомных систем и их уровней энергии.
16. Виды спектральных измерений по условиям, определяющим точность результата.
17. Интенсивности в спектрах.
18. Химические процессы, влияющие на ширину спектральной линии.
19. Обработка результатов спектральных измерений.
20. Энергетические уровни двухатомной молекулы.
21. Виды спектроскопии по свойствам излучения.
22. Естественные пределы спектральных измерений.
23. Электронная абсорбционная спектроскопия.
24. Интерпретация электронных спектров.
25. Отнесение электронных переходов.
26. Интенсивность электронных переходов.
27. Влияние полярности растворителя на спектры
28. Спектральные особенности ионов переходных металлов.
29. Критерии, помогающие отнесению полос в электронной спектроскопии.
30. Техника эксперимента в электронной спектроскопии.
31. Колебательная (ИК-, КР-) спектроскопия.
32. Концепция групповых частот в колебательной спектроскопии
33. Корреляция силовых постоянных связей.
34. Правила отбора в колебательной спектроскопии
35. Симметрия молекулярных колебаний
36. Методика эксперимента в колебательной спектроскопии.
37. Различия в ИК- и КР-спектроскопии.
38. Нормальные колебания многоатомных молекул.
39. Анализ нормальных колебаний молекулы HCN.
40. ЯМР-спектроскопия.
41. Спин-спиновые взаимодействия в ЯМР-спектроскопии.
42. Магнитные свойства ядер. Переходы в ЯМР.
43. Моделирование спектров ЯМР  $^1\text{H}$  по уравнениям Шулери
44. ЭПР-спектроскопия.

45. g-фактор.
46. Техника эксперимента в радиоспектроскопии.
47. Масс-спектроскопия.
48. Процессы фрагментации в масс-спектроскопии.
49. Интерпретация масс-спектров.
50. Хромато-масс-спектрометрия.

## **5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

### **5.1 Основная литература:**

1. Лебухов В.И. Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс]: Учебник / В.И. Лебухов, А.И. Окара, Л.П. Павлюченкова; под ред. А.И. Окара. – СПб.: Издательство «Лань», 2012. – 480 с. : ил. – (Учебник для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1320-1. – Режим доступа: [https://e.lanbook.com/book/4543#book\\_name](https://e.lanbook.com/book/4543#book_name)
2. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии [Текст] : Учебник для студентов вузов. - М.: Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. – 683 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 658-661. - ISBN 5030034706. - ISBN 5170187602 : 358.00.
3. Буков, Н.Н. Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст] : учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар : [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с. : ил. - Библиогр. : с. 46. - 8 р. 45 к.

### **5.2 Дополнительная литература:**

1. Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: Учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина. С.И. Карпов; под. Ред. В.Ф. Семенова. – СПб.: Издательство «Лань», 2014. – 416 с. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1638-7. – Режим доступа: [https://e.lanbook.com/book/50168#book\\_name](https://e.lanbook.com/book/50168#book_name)
2. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г.М. Курамшина. - М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 392-393. - ISBN 9785947747652. - ISBN 9785030038469 : 379.50.
3. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
4. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981.
5. Бенуэл К. Основы молекулярной спектроскопии. – М., 1985.

6. **Ельяшевич, Михаил Александрович.** Атомная и молекулярная спектроскопия / Ельяшевич, Михаил Александрович; Гл. ред. Е.Кудряшова. - 2-е изд. - М.: Эдиториал УРСС, 2001. - 894с.
7. **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.
8. **Векшин, Н. Л.** Флуоресцентная спектроскопия биополимеров: [краткий учебный курс] / Н. Л. Векшин; Н. Л. Векшин. - Пущино: [Фотон-век], 2008. - 168 с.
9. **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.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **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 Партнерство"]: ICSPF Press, 2011. - 694 с.

### **5.3. Периодические издания:**

Периодические издания: журналы РАН по химии, «Полимерные материалы», «Российский химический журнал», «Химическая промышленность», «Успехи химии».

## **6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

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.

Химический редактор ChemSketch:<http://www.acdlabs.com>

## **7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Общая характеристика физических методов исследования.	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Применение аборбционной УФ спектроскопии.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
3	Колебательная спектроскопия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
4	Электронный парамагнитный резонанс	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
5	Ядерно-магнитный резонанс.	Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
6	Масс-спектрометрия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
7	Аналитические испытания различными физическими методами.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к семинарным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР

**8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)**

**8.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Office (Word, Excel), ACD Labs ChemsSketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry .

**8.2 Перечень необходимых информационных справочных систем**

1. КонсультантПлюс//[www.consultant.ru](http://www.consultant.ru)
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов.  
URL: <http://fcior.edu.ru/>.
3. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru/>

**9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Для материально-технического обеспечения дисциплины используется лабораторное оборудование и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, демонстрационные модели).

При выполнении лабораторных работ для реализации методик используются: спектрофотометры, инвентарь изготовления паст и таблеток исследуемых соединений, весы аналитические. При проведении лабораторных работ используются химические реагенты и посуда.

ПЭВМ уровня не ниже Pentium IV с операционной системой Windows XP / Windows 7, Компьютерная программа Hyper Chemistry.

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
2.	Семинарские занятия	-
3.	Лабораторные занятия	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением и лаборатории факультета, укомплектованные специализированной мебелью и техническими средствами обучения.
4.	Курсовое проектирование	-
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.

6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
7.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.