

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,
качеству образования – первый
проректор

Иванов А.Г.

подпись

«30»

06

2017г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б1.В.07 МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ
И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

Направление подготовки – 04.03.01 Химия

Направленность/профиль – Неорганическая химия и химия
координационных соединений

Программа подготовки – академическая

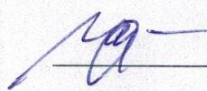
Форма обучения – очная

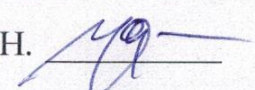
Квалификация выпускника – бакалавр

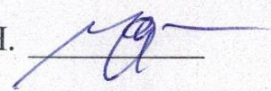
Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений» 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)

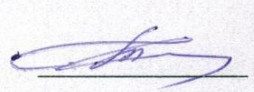
Программу составил

д.х.н., профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии Буков Н.Н.  22.06.2017 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии 22.06.2017 г., протокол № 8. Зав. кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии 22.06.2017 г., протокол № 8. Зав. кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий 27.06.2017 г., протокол № 5.

Председатель УМК факультета доцент Стороженко Т.П. 

Эксперты:

Р.В. Горохов, главный специалист ООО «Современные технологии»,
кандидат химических наук, доцент

В.А. Исаев, профессор кафедры физики и информационных систем
Кубанского государственного университета, доктор физико-математических наук, доцент

1 Цели и задачи изучения дисциплины

Преподавание курса «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений» имеет целью дать студенту понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений, важнейших для химиков спектральных методов исследования неорганических и координационных соединений, знакомство с их аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, в том числе публикуемые в научной литературе.

В курсе, кроме изучения таких методов, как УФ, ИК, ЯМР, ЭПР и масс-спектрометрия, студентам дается представление о других физических методах, позволяющих извлекать уникальную и принципиально важную информацию о строении и свойствах неорганических и координационных соединений.

1.1 Цель дисциплины

Студент должен *научиться* оптимальному выбору физических методов для решения поставленных задач, знать основы теории и эксперимента основных спектральных методов исследования и делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся спектральных данных.

1.2 Задачи дисциплины

В результате изучения данной дисциплины студенты должны

1) *знать*:

- классификацию и характеристику физических методов исследования;
- теоретические основы спектральных и спектроскопических методов;
- проблемы получения и регистрации спектров;
- методы определения энергетических и геометрических параметров молекул и веществ;
- методы электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектроскопии;
- принципы работы серийных спектральных приборов;
- стратегию применения физических методов исследования при идентификации и количественном анализе химических соединений и их смесей.

2) *уметь*:

- выбирать оптимальные физические методы исследования конкретных химических соединений и веществ;
- интерпретировать спектральные данные электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектроскопии;
- готовить исследуемые вещества для спектрального анализа в выбранном диапазоне электромагнитных волн;
- идентифицировать химические соединения по данным спектральных методов анализа;

– применять данные методов электронной, колебательной, ЯМР и масс-спектропии при исследовании химических процессов.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений» относится к вариативной части Блока 1 учебного плана. Предшествующей дисциплиной является «Физические методы исследования», читаемой в третьем семестре.

Знания, приобретенные при освоении данного курса, будут использованы при решении структурных задач выпускных квалификационных работ по неорганической химии и химии координационных соединений.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

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

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-2	владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	классификацию и характеристику методов молекулярной спектроскопии; теоретические вопросы молекулярной спектроскопии на качественном уровне	выбирать оптимальные методы молекулярной спектроскопии для исследования неорганических и координационных соединений переходных элементов	методологией молекулярной спектроскопии неорганических и координационных соединений переходных элементов
2	ПК-1	способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым	стратегию применения методов молекулярной спектроско-	применять данные методов молекулярной спектроскопии при	методологией исследования химических процессов и

№ п.п .	Ин- декс компе- тен- ции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		методикам	пии при идентифика- ции и каче- ственном анализе не- органиче- ских и коор- динацион- ных соеди- нений пере- ходных эле- ментов	исследовании химических процессов не- органических и координа- ционных со- единений	строения не- органиче- ских и коор- динацион- ных соеди- нений пере- ходных эле- ментов мето- дами моле- кулярной спектроско- пии
3	ПК-2	владением ба- зовыми навы- ками исполь- зования со- временной ап- паратуры при проведении научных ис- следований	приборную базу молеку- лярной спек- троскопии	подготовить образцы неор- ганических и координаци- онных соеди- нений и запи- сать их моле- кулярные спектры	методологи- ей молеку- лярной спек- троскопии неорганиче- ских и коор- динацион- ных соеди- нений пере- ходных эле- ментов

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 2 зач.ед. (72 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры			
			8			
Контактная работа, в том числе		40,2	40,2			
Аудиторные занятия (всего)		36	36			
Занятия лекционного типа		12	12			
Лабораторные занятия		24	24			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-			
Иная контактная работа:		4,2	4,2			
Контроль самостоятельной работы (КСР)		4	4			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе:		31,8	31,8			
Курсовая работа		-	-			
Проработка учебного материала		31,8	31,8			
Выполнение индивидуальных заданий		-	-			
Реферат		-	-			
Контроль		-	-			
Подготовка к экзамену		-	-			
Общая трудоемкость	час	72	72			
	в том числе контактная работа	40,2	40,2			
	зач. ед.	2	2			

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 8 семестре

№ раз- де- ла	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Само- стоя- тельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1.	Общая характеристика спектральных методов исследования.	3,8	2	-	-	1,8
2.	Колебательная спектроскопия неорганических и координационных соединений.	26	4	-	12	10
3.	Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений.	26	4	-	12	10
4.	Другие спектральные методы исследования неорганических и координационных соединений.	12	2	-	-	10
	<i>Всего:</i>		12	-	24	31,8

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ ра- з де- ла	Наименование раздела	Содержание раздела	Фор- ма теку- щего кон- троля
1	2	3	4
1	Введение. Общая теория	Физическая теория методов. Прямая и обратная задачи. Понятия корректной и некорректной	Т

	измерений	постановки задач физических методов.	
2	Электронная спектроскопия. Электронные состояния и электронные переходы в двухатомных и сложных молекулах. Электронные спектры поглощения молекул в видимой и ультрафиолетовой областях.	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 Каша и Малликену, концепция хромофорных и аукохромных групп, переходы с переносом заряда. Критерии отнесения полос поглощения к различным 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. 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.	ЛР
3	Колебатель-	Классическое рассмотрение колебаний про-	ЛР,

	ная спектроскопия. Спектроскопия колебательных переходов в молекулах. Применение колебательной спектроскопии в химии.	стых многоатомных молекул. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация. Фундаментальные, обертоновые 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. Характеристичность нормальных колебаний. Концепция групповых частот и её ограничения. Сопоставление ИК- и КР-спектров и выводы о симметрии молекул. Определение симметрии молекулы по данным ИК и КР спектров. Использование групповых частот в структурном анализе. 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.	К
4	Радиоспектроскопия. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР).	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}C и других ядер. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Шкалы химических сдвигов. Спин-	Т

		спиновое взаимодействие ядер и его природа. Энергетические состояния систем взаимодействующих спинов и мультипликативные функции для описания этих систем. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности между сигналами спектра ЯМР и между компонентами в мультиплете сигнала. Константы спин-спинового взаимодействия, их физический смысл, классификация и информативность. Техника и методы эксперимента. Применение метода ЯМР в химии. Структурный анализ. Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР. Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций методом ЭПР. Определение термодинамических характеристик веществ и реакций.	
5	Масс-спектрометрия. Применение масс-спектрометрии в химии.	Методы ионизации молекул. Электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация, комбинированные методы. Ионный ток и потенциал появления ионов. Принцип Франка-Кондона. Диссоциативная ионизация. Типы ионов в масс-спектрометрии. Принципы устройства масс-спектрометров. 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.	ЛР, К
6	Совместное применение	Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время различных спек-	ЛР

	спектральных методов. Другие физические методы исследования.	тральных методов. Возможности, области применения и интеграция физических методов исследования. Понятие о спектрах флуоресценции и фосфоресценции. Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и оже-спектроскопии. Методы изучения поляризуемости молекул: дисперсия оптического вращения и оптический круговой дихроизм. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР). Методы определения электрических дипольных моментов молекул. Методы определения геометрии молекул. Ядерный квадрупольный и гамма-резонансы.	
--	---	--	--

2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятия семинарского типа - не предусмотрены

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1.	Введение.	Техника безопасности при работе в химической лаборатории. Работа с электроизмерительными и оптическими приборами.	УО
2.	Электронная спектроскопия.	Измерение электронных спектров неорганических и координационных соединений	ЛР
3.	Колебательная спектроскопия.	Измерение колебательных спектров неорганических и координационных соединений	ЛР
4.	Радиоспектроскопия.	Интерпретация спектров ЭПР и ЯМР (^1H) и (^{13}C) координационных соединений	ЛР
5.	Масс-спектрометрия.	Интерпретация масс-спектров координационных соединений	ЛР
6.	Совместное применение спектральных методов.	Работа с Базами данных по молекулярным спектрам.	ЛР

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 ^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.

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
7.	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/MOLEKULARNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf
8.	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
9.	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
10.	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
11.	Масс-спектрометрия.	Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений: учебное пособие М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 548 с.
12.	Совместное применение спектральных методов.	Буков Н.Н., Буикликий 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	10

	ПР	-	
	ЛР	решение проблемных ситуаций в составе малых групп.	4
Итого:			14

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и опроса. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 8 семестре.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала

- обучаемый имеет определенное представление о спектральных методах исследования, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**незачтено**);
- обучаемый имеет четкие представления о спектральных 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 спектральных 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 осмыслении спектральных 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 все задачи самостоятельных заданий методичек №№ 2, 4, 5, аттестуются досрочно.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

по курсу «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Электронная спектроскопия»

см. Методические указания №2 - Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. стр. 32-36

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

по курсу «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Колебательная спектроскопия»

см. Методические указания №4 - Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, Краснодар, 2010. стр. 40-45

ЗАДАЧИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 3

по курсу «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Спектроскопия ЯМР ^1H »

см. Методические указания №5 - Буков Н.Н., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3. Спектроскопия ЯМР (^1H). Краснодар, ООО «Просвещение-Юг», 2000. стр. 40-45

ЗАДАЧИ ИТОГОВОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 4

по курсу «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Спектроскопия ЯМР ^1H »

см. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. М.: Химия. 1985. стр. 127-226

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. 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 ^1H 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
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
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.

5.3. Периодические издания:

Периодические журналы: «Химия и жизнь»,
«Журнал Общей химии»,
«Журнал Прикладной спектроскопии»,
«Координационная химия»,
«Журнал Структурной химии»,
«Российский химический журнал» и др.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет», необходимых для освоения дисциплины

<http://chemistry.ru/>

<http://www.himhelp.ru/>

<http://www.nglib.ru>.

<http://www.xumuk.ru/>

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

http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_frame_disp.cgi?sdbno=19659

<http://www.biblioclub.ru/>

<http://kubsu.ru/University/departments/CHEM/inorg/index.php> и др.

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	Введение	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Электронная спектроскопия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
3	Колебательная спектроскопия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
4	Радиоспектроскопия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
5	Масс-спектрометрия.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
6	Совместное применение спектральных методов.	Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО

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 Chems sketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry .

8.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

1. КонсультантПлюс//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 «Молекулярная спектроскопия неорганических и координационных соединений» 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 реактивы 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.	Самостоя- тельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, осна- щенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой эк- ранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.
----	-----------------------------	---