

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

А.Г. Иванов

2015 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.07.02 РАДИОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В АНАЛИЗЕ

Направление подготовки/специальность 04.03.01 Химия

Направленность (профиль): Аналитическая химия

Программа подготовки: академическая

Форма обучения: очная

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр

Краснодар 2015

Рабочая программа дисциплины РАДИОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В АНАЛИЗЕ составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.03.01 Химия

Программу составили:

Бурылин М.Ю., профессор кафедры аналитической химии,
д.х.н., профессор



Рабочая программа дисциплины «Радиоспектроскопические методы» утверждена на заседании кафедры Аналитической химии протокол № 9 от « 24 » апреля 2015г.
Заведующий кафедрой (разработчика) Темердашев З.А.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 5 от « 28 » апреля 2015 г.
Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Эксперт:

С.М. Прудников

Доктор химических наук, профессор кафедры химии, метрологии и стандартизации КубГТУ

Рабочая программа учебной дисциплины
«Б1.В.ДВ.07.02 Радиоспектроскопические методы в анализе»
для студентов факультета химии и высоких технологий
направление подготовки 04.03.01 - Химия

1. Цели и задачи освоения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

- обучить студентов владению современными методами исследования ЯМР и ЭПР спектроскопии, освоить основные приемы работы и принципы исследования комплексных соединений.
- подготовить к самостоятельному решению практических задач в данной области от постановки задачи и планирования эксперимента до получения конечного результата.

1.2. Задачи учебной дисциплины:

- знакомство студентов с основными методами исследования комплексных соединений, обработки результатов спектроскопических исследований, принципами планирования эксперимента, моделирования спектров сложных равновесных систем.
- студенты должны познакомиться с современными методами, научным оборудованием и программным обеспечением. Уметь активно применять современные методы исследования в профессиональной сфере.

1.3 Место дисциплины в структуре ООП ВО

Данная дисциплина относится к вариативной части дисциплин по направлению подготовки 04.03.01 Химия (квалификация «бакалавр»), информационно и логически связана со следующими дисциплинами:

- химия (свойства неорганических и органических веществ, свойства элементов);
- аналитическая химия и физико-химические методы анализа (спектральные методы анализа, отбор проб и пробоподготовка);
- физика (строение атома, квантовая физика, теория относительности).

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Для реализации возможности осуществления профессиональной деятельности в сфере аналитики в учреждениях, осуществляющих контроль радиационной безопасностью, у студентов в процессе изучения дисциплины «Радиоспектроскопические методы анализа» формируются следующие профессиональные навыки:

- знать теоретические основы радиоспектроскопических методов исследования (ЯМР, ЭПР) и подходы интерпретации результатов измерений в исследовании веществ и материалов;
- знать основные физические законы и явления, лежащие в основе радиоспектроскопических методов анализа; корреляцию измеряемых величин и свойства исследуемых веществ;
- способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам.

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач.	Теоретические основы радиоспектроскопических методов исследования (ЯМР, ЭПР) и подходы интерпретации результатов измерений в исследовании веществ и материалов.	Интерпретировать результаты ЯМР и ЭПР исследований; обосновать свойства исследуемых веществ по результатам измерений.	Навыками построения схемы исследований методами радиоспектроскопии; обоснования условий измерений в зависимости от предполагаемых свойств исследуемого вещества.
2.	ПК-1	Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Устройство и работу, как отдельных узлов радиоспектроскопического оборудования, так и всего измерительного комплекса в целом.	Подготовить радиоспектроскопическое оборудование к работе; подготовить образцы к исследованию методами ЯМР и ЭПР; выполнить измерения на радиоспектроскопическом оборудовании.	Навыками практического применения известных методик измерения методами ЯМР и ЭПР; интерпретации полученных результатов измерений.
3.	ПК-4	Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов.	Основные физические законы и явления, лежащие в основе радиоспектроскопических методов анализа; корреляцию измеряемых величин и свойства исследуемых веществ.	По результатам проведенных измерений радиоспектроскопическими методами обосновать качественные и количественные характеристики состава и структуры исследуемых веществ.	Навыками применения основных естественнонаучных законов и закономерностей химической науки при анализе полученных результатов.

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц (180 часов, из них – 112 часов аудиторной нагрузки: лекционных 36 ч., лабораторных 76 ч., 45,6 часа самостоятельной работы; 22 часа КСР, 0,4 часа ИКР)

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)			
		5	6		
Контактная работа, в том числе:					
Аудиторные занятия (всего):	112	54	58		
Занятия лекционного типа	36	18	18	-	-
Лабораторные занятия	76	36	40	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-
Иная контактная работа:					
Контроль самостоятельной работы (КСР) (в том числе курсовая работа 16 часов)	22	2	20		
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,4	0,2	0,2		
Самостоятельная работа, в том числе:	45,6	15,8	29,8		
Проработка учебного (теоретического) материала	6,8	3,8	3	-	-
Курсовая работа (подготовка и написание)	20	5	15		
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)	3	-	3	-	-
Реферат	-	-	-	-	-
Подготовка к текущему контролю	15,8	7	8,8	-	-
Контроль:					
Подготовка к экзамену	-	-	-		
Общая трудоемкость	час.	180	72	108	-
	в том числе контактная работа	134,4	56,2	78,2	
	зач. ед	5	2	3	

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Спектроскопия ЭПР	39	8		26	5
2	Спектроскопия ЯМР	45	8		32	5
3	ЯМ релаксация	14,6	8		-	6,6
4	Исследование координационных соединений	17	6		6	5
5	ЯМР твердого тела	22	6		12	4
	Курсовая работа	20				20

№ раз-дела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
	Всего:		36		76	45,6

2.3. Содержание разделов дисциплины

Семестр 5

№ раз-дела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Спектроскопия ЭПР	Основные понятия спектроскопии ЭПР. Устройство ЭПР спектрометра. Параметры спектров ЭПР (g-фактор, константа СТВ, ширина линии). Области применения спектроскопии ЭПР.	Рефераты
2.	Спектроскопия ЯМР	Основные понятия спектроскопии ЯМР. Области применения спектроскопии ЯМР. Параметры спектров ЯМР. Устройство ЯМР спектрометра. Специальные методики: методы двойного резонанса, ЯЭО и др. Многомерные эксперименты: корреляционная, J-спектроскопия, селективные методы и их применение к исследованию комплексных соединений и биологических систем.	Контрольная работа

Семестр 6.

№ раз-дела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	ЯМ релаксация	Релаксационные методы и их применение к исследованию комплексных соединений. Измерение времен релаксации. ЯМ релаксометры. Влияние химического окружения на времена релаксации. Расчеты параметров комплексных соединений, проводимые на основании релаксационных данных.	Рефераты
2	Исследование координатных соединений	Равновесие в растворах комплексных соединений. Методы определения констант устойчивости спектроскопическими ме-	Контрольная работа

		тодами. Информация, получаемая из ЯМР и ЭПР спектров комплексных соединений. Получение и анализ структурных данных; применение лантаноидных сдвигающих реагентов. Исследование кинетики и механизма реакций комплексообразования. Исследование обменных процессов в условиях быстрого и медленного обмена. Анализ формы линии спектров ЯМР и ЭПР с использованием метода матрицы спиновой плотности.	
3	ЯМР твердого тела	ЯМР спектроскопия твердого тела. Особенности экспериментальных техник. Вращение под магическим углом. Получение структурной информации из спектров ЯМР твердого тела.	Рефераты, контрольная работа

2.3.1. Лекционные занятия

5 семестр

Темы лекций

№	Тема	Часов
1	Основные понятия спектроскопии ЭПР. Устройство ЭПР спектрометра. Параметры спектров ЭПР (g-фактор, константа СТВ, ширина линии). Области применения спектроскопии ЭПР.	8
2	Основные понятия спектроскопии ЯМР. Области применения спектроскопии ЯМР. Параметры спектров ЯМР. Устройство ЯМР спектрометра. Специальные методики: методы двойного резонанса, ЯЭО и др. Многомерные эксперименты: корреляционная, J-спектроскопия, селективные методы и их применение к исследованию комплексных соединений и биологических систем.	10

Итого 18 часов

6 семестр

№	Тема	Час.
3	Релаксационные методы и их применение к исследованию комплексных соединений. Измерение времен релаксации. ЯМ релаксометры. Влияние химического окружения на времена релаксации. Расчеты параметров комплексных соединений, проводимые на основании релаксационных данных.	6

4	Равновесие в растворах комплексных соединений. Методы определения констант устойчивости спектроскопическими методами. Информация, получаемая из ЯМР и ЭПР спектров комплексных соединений. Получение и анализ структурных данных; применение лантаноидных сдвигающих реагентов. Исследование кинетики и механизма реакций комплексообразования. Исследование обменных процессов в условиях быстрого и медленного обмена. Анализ формы линии спектров ЯМР и ЭПР с использованием метода матрицы спиновой плотности.	6
5	ЯМР спектроскопия твердого тела. Особенности экспериментальных техник. Вращение под магическим углом. Получение структурной информации из спектров ЯМР твердого тела.	6

Итого 18 часов

2.3.2 Лабораторные работы

№	Тема	Час.
1.	Знакомство с ЭПР спектрометром. Съёмка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	16
2.	Исследования комплексообразования меди с органическими лигандами. Приготовление растворов, съёмка спектров.	6
3	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	6
4	Знакомство с ЯМР спектрометром. Съёмка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	12
5	Исследование структуры соединений. Специальные методики.	12
6	Исследования комплексообразования РЗЭ с органическими лигандами. Приготовление растворов, съёмка спектров	6
7	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	6
8	Приготовление образцов твердого тела, съёмка спектров, расшифровка результатов	12
	Всего:	76

Студентам необходимо использовать «Методические рекомендации к выполнению лабораторных работ по курсу Радиоспектроскопические методы в анализе»

2.3.3. Курсовые работы – предусмотрены в 6 семестре

Примерная тематика курсовых работ (Контролируемые компетенции ОПК-1; ПК-1; ПК-4)

1.	Электротермическое атомно-абсорбционное определение свинца в суспензиях почв
2.	Исследование возможности тест-определения общего белка в биологических жидкостях по реакции с бромпирогаллоловым красным
3.	Оценка селективности реагентов, используемых для спектрофотометрического определения белков в биологических жидкостях
4.	Электротермическое атомно-абсорбционное определение кадмия в суспензиях почв
5.	Применение хромато-масс-спектрометрии в целях установления личности с использованием потожиловых профилей отпечатков пальцев

6.	Определение состава отложений, образованных в теплообменниках систем горячего водоснабжения Черноморского побережья Краснодарского края, методами рентгенофлуоресцентного и рентгенофазового анализа
7.	Определение эндогенных стероидных гормонов в биологических жидкостях человека с использованием методов хромато-масс-спектрометрии
8.	Определение карнозина в мясосодержащей продукции
9.	Выбор вещества-стандарта для определения аминокислот в яблочном соке
10.	Установление возможности оценки количественного значения показателя антиоксидантная активность черного чая «Краснодарский»
11.	Установление возможности оценки количественного значения показателя Фолина–Чиокальтео (суммарное содержание полифенольных соединений) черного чая «Краснодарский»
12.	Выбор условий определения антиоксидантной активности пищевых продуктов (на примере чая) в индикаторной системе с генерированием радикалов
13.	Оценка возможности использования показателя АОО при составлении лекарственных сборов
14.	Косвенная оценка антиоксидантной активности чая по величине E _h настоев
15.	Изучение возможности косвенного определения общего белка методом сорбционной спектроскопии на желатиновой матрице
16.	Определение кофеина в некоторых напитках и биожидкостях человека методами хромато-масс-спектрометрии
17.	Разработка способа подготовки проб сточных вод, загрязненных нефтепродуктами, для целей ИВ-определения тяжелых металлов
18.	Исследование формирования аналитического сигнала при сорбционно-рентгенофлуоресцентном определении элементов на фоне сложной аналитической матрицы
19.	Исследование сорбции органических реагентов на оксиде алюминия
20.	Исследование сорбционного концентрирования ионов меди на иммобилизованном оксиде алюминия
21.	Оценка эффективности модификаторов-окислителей при атомно-абсорбционном определении элементов в пробах с высоким содержанием органической матрицы
22.	Изучение мультиэлементного состава вин юга России
23.	Определение ртути в водах методом АЭС-ИСП с генерацией гидридов
24.	Определение стимуляторов и каннабимметиков в биологических жидкостях человека методами хромато-масс-спектрометрии
25.	Сорбционно-спектроскопическое определение тяжелых металлов в природных и сточных водах с использованием силикагелей с иммобилизованной гуаназильной группой
26.	Сорбционные материалы на основе 1,3-бис[(гетарил)метиленамино]гуанидина для рентгенофлуоресцентного определения тяжелых металлов в природных и техногенных водах
27.	Изучение условий сорбционного концентрирования ионов алюминия для определения в питьевой воде
28.	Оптимизация условий в схеме электротермического атомно-абсорбционного определения ртути в суспензиях донных отложений
29.	Определение гистамина в пищевых продуктах флуориметрическим методом
30.	Возможность оценки качества меда по показателю

	антиоксидантная активность
31.	Установление зависимости между величинами антиоксидантной активности пива и некоторыми показателями его качества
32.	Буферная емкость молочных продуктов как показатель их натуральности (на примере молока и сыра)
33.	Выбор физико-химических показателей молока для установления его натуральности
34.	Статистический анализ данных элементного состава образцов винограда, отобранных на территории Темрюкского района
35.	Статистический анализ данных элементного состава образцов почв Темрюкского района, используемых под возделывание винограда
36.	Исследование закономерностей взаимодействия красителей группы 3,4,5-тригидроксифлуоронов с молекулами белков
37.	Исследование свойств химических модификаторов на основе церия для электротермического атомно-абсорбционного определения элементов
38.	Влияние микроволнового излучения на экстракцию биологически активных веществ из зверобоя продырявленного
39.	Определение антоцианов в красных сухих винах
40.	Исследование поведения индивидуальных антиоксидантов в системе, содержащей комплекс Fe(III)-органический реагент
41.	Сочетание рентгенофлуоресцентного детектирования и микроэкстракционного концентрирования для определения низких содержаний тяжелых металлов в природных водах
42.	Электротермическое атомно-абсорбционное определение никеля в донных отложениях с использованием техники фотохимической генерации
43.	ИСП-МС определение серебра в биологических образцах животного происхождения
44.	Сорбционное извлечение пищевого красителя индигокармина из водных растворов оксидом алюминия
45.	Получение азоокисей – потенциальных рострегуляторов для зерновых культур
46.	ИСП-МС-определение диоксида титана в природной воде
47.	ИСП-МС-определение диоксида титана в образцах косметики
48.	Сорбционно-спектроскопическое определение Cu(II) по реакции с 3,4,5-тригидроксифлуоронами, иммобилизованными в отвержденный желатиновый гель
49.	Сорбция пищевого красителя индигокармина в желатиновую матрицу
50.	Некоторые сорбционные характеристики модифицированного силикагеля в условиях конкурентной сорбции
51.	Некоторые сорбционные характеристики модифицированного силикагеля по отношению к Cu(II), Ni(II), Co(II), Cd(II)
52.	Получение мезопористых силикагелей и аналитических сорбентов на их основе
53.	Изучение особенностей экстракции карнозоловой кислоты из лекарственного растительного сырья
54.	Оценка возможности использования графитового сорбента для ТФЭ фенольных соединений растительного происхождения
55.	ИСП-МС-определение диоксида титана в природной воде

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
	2	3
	Проработка учебного (теоретического) материала	1 Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с.
	Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с.
	Подготовка к текущему контролю	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с.

3. Образовательные технологии

В процессе освоения данной учебной дисциплины используются следующие образовательные технологии: аудиторная работа в виде традиционных форм: лекции, семинары, практические занятия и т.п.; самостоятельная работа студентов, групповые дискуссии. Предусмотрены контактные часы, в рамках которых преподаватель, с одной стороны, оказывает индивидуальные консультации по ходу выполнения самостоятельных заданий, а с другой стороны, осуществляет контроль и оценивает результаты этих индивидуальных заданий, применяется обсуждение результатов работы студенческих исследовательских групп. Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции. В рамках изучения курса предусмотрено посещение физико-химических лабораторий Эколого-аналитического центра и центра коллективного пользования Кубанского госуниверситета.

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
5	Л		0
	ПР	-	0
	ЛР	Обсуждение результатов работы студенческих исследовательских групп	26
6	Л		0
	ПР		0
	ЛР	Решение проблемной задачи по обоснованию и оптимизации	24

		схемы измерений	
<i>Итого:</i>			50

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья реализуются индивидуальные образовательные технологии, которые позволяют полностью индивидуализировать содержание, методы и темпы учебной деятельности инвалида, вносить вовремя необходимые коррекции как в деятельность студента-инвалида, так и в деятельность преподавателя.

При реализации образовательных технологий используются следующие виды самостоятельной работы студентов:

- работа с конспектом лекции (обработка текста);
- повторная работа над учебным материалом учебника;
- решение задач и упражнений по образцу;
- решение вариативных задач и упражнений;
- подготовка к лабораторной работе;
- обработка результатов лабораторных работ;
- поиск информации в сети Интернет и литературе;
- подготовка к сдаче зачёта;

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

4.1.1. Материалы для проведения текущего, промежуточного и итогового контроля знаний

5 семестр

№ раздела	Разделы, темы программы	Вид контроля	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Основные понятия спектроскопии ЭПР. Параметры спектров ЭПР (g-фактор, константа СТВ, ширина линии). Особенности ЭПР растворов	Самостоятельная работа	ОПК-1, ПК-2, ПК-4
2	Основные понятия спектроскопии ЯМР. Параметры спектров ЯМР. Устройство ЯМР спектрометра. Импульсный ЯМР и его особенности. Применение импульсных методов		

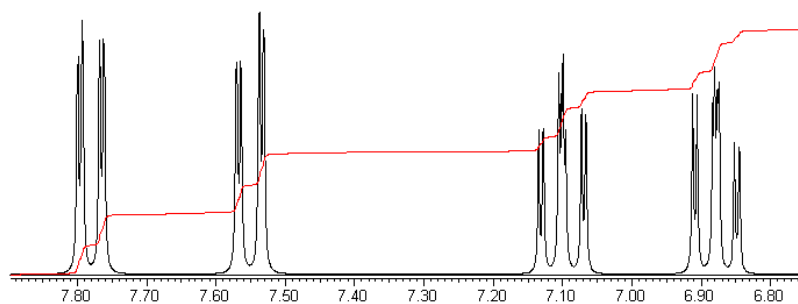
6 семестр

№ разде- ла	Тема	Вид контроля	Компетен- ции, которых контролиру- ются
1.	Методы определения структуры соединений: Специальные методики: методы двойного резонанса, ЯЭО и др. Многомерные эксперименты. Измерение времен релаксации.	Самостоятель- ная работа	ОПК-1, ПК-2, ПК-4
2.	Равновесия в растворах комплексных соединений. Устойчивость комплексных соединений Методы определения констант устойчивости спектроскопическими методами.		ОПК-1, ПК-2, ПК-4
3.	Информация, получаемая из ЯМР и ЭПР спектров комплексных соединений. Исследование кинетики и механизма реакций комплексообразования.	Самостоятель- ная работа	ОПК-1, ПК-2, ПК-4
4.	Анализ формы линии. Классическое рассмотрение. Квантово-химическое рассмотрение. Анализ формы линии спектров ЯМР и ЭПР с использованием метода матрицы спиновой плотности.		ОПК-1, ПК-2, ПК-4
5.	ЯМР спектроскопия твердого тела. Особенности экспериментальных техник. Вращение под магическим углом.	Самостоятель- ная работа	ОПК-1, ПК-2, ПК-4
6.	Получение структурной информации из спектров ЯМР твердого тела.		ОПК-1, ПК-2, ПК-4

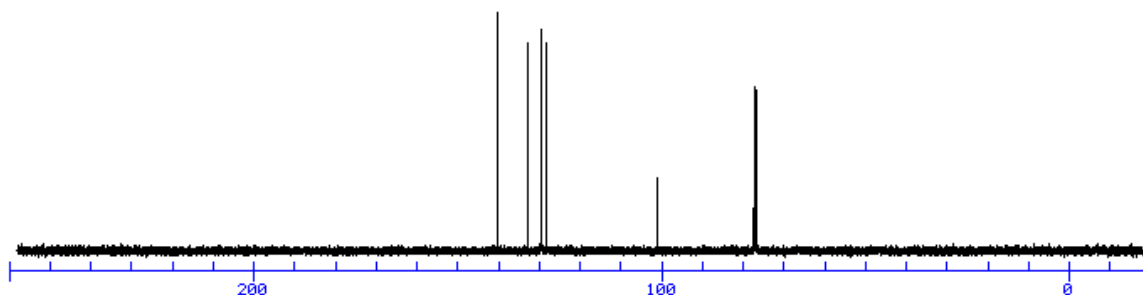
ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ
по теме «Исследование структуры соединений»

Вариант №4.

^1H ЯМР спектр - $\text{C}_6\text{H}_4\text{BrI}$



^{13}C ЯМР спектр - $\text{C}_6\text{H}_4\text{BrI}$ (140.2, 132.6, 129.6, 129.3, 128.3, 101.1, 77.3, 76.9, 76.6)



Вопросы к зачету

1. Явление ядерного магнитного резонанса. Классическое описание.
2. Устройство спектрометра ЯМР.
3. Основные параметры спектра ЯМР. Химический сдвиг.
4. Основные параметры спектра ЯМР. Константа спин-спиновой взаимодействия.
5. Процессы релаксации. Природа спин-решеточной и спин-спиновой релаксации.
6. Общий подход к анализу спектров ЯМР. Анализ спектров первого и более высоких порядков.
7. Специальные методы эксперимента в спектроскопии ЯМР. Методы двойного и множественного резонанса. Многомерная спектроскопия ЯМР, основные типы экспериментов.
8. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР. Понятие быстрого и медленного обмена. Точка коалесценции.
9. Изменения спектров ЯМР, вызываемые процессами комплексообразования. Анализ систем в приближении медленного обмена.
10. Анализ спектров в приближении быстрого обмена. Понятие предельного химического сдвига. Использование аддитивной модели для наблюдаемого химического сдвига для расчета параметров динамических систем.
11. Анализ формы линии спектра. Классический подход (метод ГМС).
12. Квантовомеханический подход к описанию спектров. Теория матрицы спиновой плотности.
13. Принцип метода ЭПР. Теория метода. Эффект Зеемана.
14. Устройство спектрометра ЭПР.
15. Основные параметры спектров ЭПР. g-фактор.

16. Основные параметры спектров ЭПР. Константа СТВ. Природа сверхтонкого взаимодействия.
17. Уширение линий спектра ЭПР. Механизмы процессов уширения.
18. Применение спектроскопии ЭПР для исследования координационных соединений. Исследования в твердом виде и в растворах.
19. Форма линии спектра ЭПР. Классическое описание спектров ЭПР (метод кривых Лоренца.). Ограничения метода.
20. Применение метода матрицы спиновой плотности к описанию динамических систем.

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета. К зачету студенты обязаны выполнить и защитить все лабораторные работы, предусмотренные программой. Промежуточная аттестация преследует цель оценить уровень формирования компетенций, развитие творческого мышления, приобретение навыков самостоятельной работы, умение применять полученные знания для решения практических задач.

Форма проведения зачета - устно или письменно устанавливается решением кафедры. Преподавателю вправе задавать студентам дополнительные вопросы по всей учебной программе дисциплины. Результат сдачи зачета заносится преподавателем в экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Критерии оценки:

- **отметка «зачтено»** выставляется с учетом сформированности компетенций, если дан полный, правильный ответ, материал изложен в определенной логической последовательности, демонстрируется понимание сути выполненных лабораторных работ, задача решена рациональным способом.

- **отметка «незачтено»** выставляется, если ответ студента обнаруживает незнание основного содержания учебного материала, а также в случае невыполнения лабораторных работ, предусмотренных программой.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме на языке Брайля.

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,
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

- при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

- при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

- при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- 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.

Курсовые работы

Темы курсовых работ утверждаются на заседании кафедры, выбор темы студентом фиксируется в специальном заявлении.

Основными целями выполнения и защиты курсовой работы являются:

- углубление, систематизация и интеграция теоретических знаний и практических навыков по направлению подготовки;
- развитие умения критически оценивать и обобщать теоретические положения;
- применение полученных знаний при решении прикладных задач по направлению подготовки;
- стимулирование навыков самостоятельной аналитической работы;
- овладение современными методами научного исследования;
- выявление степени подготовленности магистрантов к практической деятельности в современных условиях;

- демонстрация навыков публичной дискуссии и защиты научных идей, предложений и рекомендаций.

Курсовой работе должны быть присущи актуальность и новизна. Работа должна иметь научную и практическую ценность. Результаты защиты оценивают оценками «отлично», «хорошо» «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Студент выполняет курсовую работу самостоятельно под руководством научного руководителя.

Научный руководитель контролирует все стадии подготовки и написания работы вплоть до ее защиты. На основании письменного заявления студента по установленной форме о закреплении избранной темы выпускающая кафедра назначает научного руководителя выпускной квалификационной работы. Руководитель регулярно консультирует студента по вопросам содержания и оформления работы, последовательности изложения вопросов, оказывает помощь в сборе дополнительной информации, информирует кафедру о положении дел у студента в части подготовки работы.

Курсовая работа имеет общепринятую структуру.

Основные структурные элементы курсовой работы:

- Введение;
- Аналитический обзор;
- Экспериментальную часть;
- Обсуждение полученных результатов;
- Выводы (заключение);
- Список литературы.

Во введении кратко обосновывается необходимость и практическое и (или) научное значение выполняемых исследований.

Аналитический обзор должен содержать полное описание состояния изучаемой проблемы. Обзор литературных источников или степень разработанности темы работы является важной частью бакалаврской работы. Обзор литературы должен осветить степень разработанности научной проблемы и представляет собой список авторов, которые работали в области изучаемой проблемы ранее и чьи разработки прямым или косвенным образом относятся к предмету исследования.

Экспериментальная часть должна содержать подробное описание всех использованных реактивов с указанием степени их чистоты, а также используемое аналитическое оборудование. Методики выполнения всех исследований должны быть подробно описаны. Полученные экспериментальные данные приводятся в тексте работы или в приложении.

Раздел «Обсуждение результатов» включает оценку полученных результатов, объяснение полученных зависимостей, описание выявленных в ходе эксперимента закономерностей, рекомендации по практическому использованию полученных результатов.

Выводы должны содержать краткое обобщение полученных результатов и выявленных закономерностей и не являются простым перечислением выполненных работ.

Критерии выставления оценок за курсовую работу

Отлично: Знания глубокие, осмысленные, практические умения и навыки на высоком профессиональном уровне с демонстрацией признаков самостоятельности. Курсовая работа выполнена на актуальную тему, четко формализованы цель и задачи исследования, раскрыта суть проблемы. В ходе защиты студент продемонстрировал свободное владение материалом, уверенно излагал результаты исследования, представил презентацию, в достаточной степени отражающую суть работы.

Хорошо: Знания достаточно глубокие, практические умения и навыки развиты на высоком профессиональном уровне, однако не демонстрируют признаков самостоятельности. ВКР выполнена на актуальную тему, четко формализованы цель и задачи исследования, Стиль изложения научный со ссылками на источники. В ходе защиты студент уверенно излагал результаты исследования, представил презентацию, в достаточной степени отражающую суть диссертации. Однако были допущены незначительные неточности при изложении материала, не искажающие основного содержания по существу, презентация имеет неточности, ответы на вопросы при обсуждении работы были недостаточно полными.

Удовлетворительно: Уровень знаний, умений и навыков достигает минимально допустимого уровня: недостаточно глубокие, наблюдаются лишь отдельные попытки системного мышления. ВКР выполнена на актуальную тему, формализованы цель и задачи исследования, тема раскрыта, изложение описательное со ссылками на источники, однако нет увязки сущности темы с наиболее значимыми направлениями решения проблемы и применяемыми механизмами или методами. Сформулированы предложения и рекомендации, которые носят общий характер или недостаточно аргументированы. В ходе защиты допущены неточности при изложении материала, достоверность некоторых выводов не доказана.

Неудовлетворительно: Студент нарушил календарный план разработки курсовой работы, выполненной на актуальную тему, которая раскрыта не полностью, структура не совсем логична, (нет увязки сущности темы с наиболее значимыми направлениями решения проблемы и применяемыми механизмами или методами). Сформулированы предложения и рекомендации общего характера, которые недостаточно аргументированы. Допущены неточности при изложении материала, достоверность некоторых выводов не доказана. Автор не может разобраться в конкретной практической ситуации, не обладает достаточными знаниями и практическими навыками.

4.1.2. Методические указания к самостоятельной работе студентов

Подготовка к лабораторной работе. При подготовке к лабораторной работе необходимо внимательно изучить теоретический материал по данной работе, технику выполнения эксперимента, ознакомиться с инструкциями к приборам, которые используются при выполнении работы.

Обработка результатов лабораторных работ. Отчёт о лабораторной работе должен содержать все полученные экспериментальные результаты, необходимые расчёты и выводы. При фиксировании результатов измерения особое внимание нужно обратить на соответствие записи (количество значащих цифр в числе) точности измерения. Расчёты должны содержать все формулы и вычисления с указанием единиц измерения. Все результаты измерений непосредственно фиксируются в рабочей тетради. Запись результатов измерений на черновике или карандашом не допускается. При выполнении вычислений необходимо соблюдать правила округления. Все графики выполняются только на миллиметровой бумаге. Графики обязательно должны содержать заголов-

ки, обозначения осей с указанием единиц измерений и выполняться с соблюдением определенного масштаба.

Отчёт должен предоставляться преподавателю для проверки в течение недели после выполнения лабораторной работы. Проверка лабораторной работы сопровождается собеседованием с преподавателем. Выполненными считаются только принятые преподавателем лабораторные работы!

Решение задач. Перед решением задач необходимо внимательно изучить теоретический материал, проработать конспект лекции, разобрать примеры решения задач. Решение задач рекомендуется начинать с наиболее простых, близких к имеющимся в задачниках примерам. Не рекомендуется использовать готовые конечные формулы, которые выводятся в примерах решения задач. Запись в тетради должна содержать формулы и все вычисления с указанием единиц измерения. При вычислениях необходимо обращать внимание на их точность (использование нужного числа значащих цифр) и соблюдение правил округления.

5. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1. Основная литература

1. Ядерный магнитный резонанс в структурных исследованиях [Текст] / В. Т. Панюшкин, Ю. Е. Черныш, В. А. Волынкин и др. ; отв. ред. Р. З. Сагдеев. - Москва : URSS : [КРАСАНД], 2017. - 350 с. : ил. - Библиогр.: с. 345-349. - ISBN 978-5-396-00746-8 :

2. Устынюк, Юрий Александрович. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст] . Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. - Москва : Техносфера, 2016. - 285 с. : ил. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 285. - ISBN 978-5-94836-410-0

3. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. Издательство: Издательство "Физматлит". ISBN: 978-5-9221-1202-4. 2010. 384 с.

<https://e.lanbook.com/reader/book/2151/#1>

5.2. Дополнительная литература:

Г. Кристиан. Аналитическая химия; пер. с англ. А. В. Гармаша и др. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 504 с. - (Лучший зарубежный учебник). - Библиогр. в конце глав. - ISBN 9785947743890. - ISBN 9785947743913. - ISBN 0471214728. 45 шт

5.3. Периодические издания

Периодические журналы: "Journal of magnetic resonance"; "Журнал структурной химии".

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, необходимые для освоения дисциплины (модуля).

1. <http://www.sciencedirect.com>

2. <http://www.spectroscopynow.com>

3. <http://www.msg.ameslab.gov/games/>

4. База данных Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU

7. Методические указания и материалы по видам занятий

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 (модулю).

8.2 Перечень необходимого лицензионного программного обеспечения:

1. ACD Labs Chems sketch;
2. HyperChem 8.0;
3. МОРАС;
4. JEOL Delta.

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

	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория
2.	Семинарские занятия	Не предусмотрены
3.	Лабораторные занятия	Лаборатории, оснащенные аналитическим оборудованием ЯМР спектрометры JEOL JMN-ECA-400, TESLA BS-587A, ЭПР спектрометры JEOL JES FA-300, Radiopan SE/X-2543.
4.	Курсовое проектирование	Курсовые работы выполняются в химических лабораториях кафедры аналитической химии и УНПК «Аналит»
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебные помещения факультета химии и высоких технологий
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебные помещения факультета химии и высоких технологий
7.	Самостоятельная работа	Самостоятельная работа студентов осуществляется в читальных залах библиотеки КубГУ, зале реферативных журналов, вычислительном центре КубГУ, Интернет-центре, а также других аудиториях факультета химии и высоких технологий с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.