

МИНОРБНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕН-
НЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ

Директор института химии
д.х.н., проф. Федотова О.В.

"10" сентября 2019 г.



Рабочая программа дисциплины
Физические методы анализа и исследования

Направление подготовки бакалавриата
04.03.01 Химия

Профиль подготовки бакалавриата
Аналитическая химия и химическая экспертиза

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2019

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Панкратов Алексей Николаевич		10.09.2019
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		10.09.2019
Заведующий кафедрой	Русанова Татьяна Юрьевна		10.09.2019
Специалист Учебного управления	Зимина Елена Валерьевна		10.09.2019

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «*Физические методы анализа и исследования*» является формирование у студентов компетенций, связанных с пониманием теоретических и практических основ физических методов анализа и исследования в химии, умением использовать их для решения интерпретационных и прикладных задач химии, а также выяснение вопросов, связанных с физическими теориями взаимодействия электромагнитного поля, излучения или потока частиц с молекулой в определенных условиях, для последующего выполнения профессиональных теоретических и прикладных задач.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «*Физические методы анализа и исследования*» (Б1.В.05) относится к дисциплине части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 04.03.01 «Химия», профилю «Аналитическая химия и химическая экспертиза» и читается в 7-м семестре.

Дисциплина обеспечивает содержательную взаимосвязь дисциплин профиля подготовки «Аналитическая химия и химическая экспертиза». Материал дисциплины базируется на знаниях по элементарной и высшей математике, информатике, физике, неорганической, органической, аналитической, физической химии в объеме курсов ООП по направлению 04.03.01 «Химия».

Приступая к изучению дисциплины, студент должен:

- знать основные разделы элементарной и высшей математики, информатики, физики, неорганической, органической, аналитической, физической химии;
- уметь выполнять основные арифметические действия и действия с элементарными функциями, выполнять тождественные преобразования, решать уравнения и системы уравнений в рамках элементарной математики, дифференцировать, интегрировать, решать обыкновенные дифференциальные уравнения, простейшие операторные уравнения, оперировать рядами;
- уметь осуществлять направленный поиск ресурсов в сети Интернет;
- владеть теоретическими представлениями механики, молекулярной физики, электричества и магнетизма, оптики, ядерной физики, неорганической, органической, аналитической, физической химии;
- владеть навыками пользования персональным компьютером и стандартным программным обеспечением.

Освоение дисциплины необходимо как одновременно изучаемое или предшествующее следующим дисциплинам: «*Методы разделения и концентрирования*», «*Спектроскопические методы анализа и исследования*», «*Спектроскопические методы в экспертизе*», «*Современные электроаналитические методы*», «*Ионометрические методы в экспертизе качества сырья и готовой продукции*», «*Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия*», «*Методы анализа объектов окружающей среды*», «*Методы и средства экспресс-анализа*», «*Методы синтеза, очистки и идентификации неорганических веществ*».

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
<p>ПК-1: Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования</p> <p>ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности</p> <p>ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин</p>	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> • перспективы развития новых научных направлений; • логику развития химических знаний и методов; <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> • сравнивать различные уровни развития химического знания по уровню развития экспериментальных методов; <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • приёмами получения и применения химического знания для решения задач профессиональной деятельности.
<p>ПК-2: Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации</p>	<p>ПК-2.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР</p> <p>ПК-2.2. Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР</p> <p>ПК-2.3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР</p>	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> • методологию планирования; • логику развития химических знаний и методов; <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> • составлять план и программу отдельных стадий исследования, опираясь на общий план НИР; • выбирать методы исследования, их аппаратное и компьютерное обеспечение; <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • методологией планирования стадий научного исследования, составления программ этапов НИР.

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
<p>ПК-5: Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения под руководством специалистов более высокой квалификации</p>	<p>ПК-5.1. Выбирает методы и средства контроля качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения на соответствие требуемой нормативной документации</p> <p>ПК-5.2. Выполняет стандартные операции на типовом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства</p> <p>ПК-5.3. Составляет протоколы испытаний, отчёты о выполненной работе по заданной форме</p> <p>ПК-5.4. Осуществляет контроль точности аналитического оборудования на соответствие требуемой нормативной документации</p>	<p><i>знать:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • методы и средства контроля качества сырья, компонентов и выпускаемой химической продукции; • логику развития химических знаний и методов; <p><i>уметь:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • работать на типовом оборудовании; • составлять отчёты о выполняемой работе; <p><i>владеть:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • методологией контроля точности аналитического оборудования.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачётных единиц, 216 часов: из них 36 – лекционных, 54 – лабораторных, 90 – часов самостоятельной работы, 36 – экзамен. Форма отчётности предусмотрена в виде экзамена в 7 семестре. В процессе подготовки студент должен подготовить реферат на заданную преподавателем тему.

4.1. Структура лекционного курса

№ п/п	Раздел дисциплины	Се-местр	Неде-ля се-мест-ра	Виды учебной работы, включая са-мостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Формы теку-щего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы проме-жуточной ат-тестации (по семестрам)
				Лек-ции	Лаб. раб.	Само-стоя-тельная работа	Кон-троль	
1	2	3	4	5	6	7		8
1	Понятие о физических методах анализа и исследования. Основы молекулярной спектроскопии	7	1	2	2	4		Устный отчёт
2	Методы колебательной спектроскопии	7	2	2	4	6		Устный отчёт
3	Нормально-координатный анализ. Концепция групповых колебаний	7	3	2	2	4		Критическое коллективное обсуждение
4	Спектроскопия по отражению. Метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО). Применение ИК спектроскопии	7	4	2	2	4		Критическое коллективное обсуждение
5	Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР)	7	5	2	4	6		Коллоквиум по колебательной спектроскопии
6	Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул	7	6	2	2	4		Консультация по индивидуальному проекту
7	Электронная абсорбционная спектроскопия многоатомных молекул	7	7	2	4	6		Устный отчёт
8	Правила отбора. Концепция хромофоров и ауксохромов. Применение электронной абсорбционной спектроскопии	7	8	2	2	4		Критическое коллективное обсуждение
9	Спектры оптического кругового дихроизма (КД)	7	9	2	4	6		Устный отчёт
10	Дисперсия оптического вращения (ДОВ). Применение методов ДОВ и КД	7	10	2	4	6		Критическое коллективное обсуждение
11	Эффект Фарадея	7	11	2	4	6		Коллоквиум по электронной спектроскопии
12	Ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Модель вращающегося заряда. Спин-решёточная и спин-спиновая релаксация	7	12	2	4	6		Консультация по индивидуальному проекту
13	Химический сдвиг	7	13	2	2	4		Устный отчёт
14	Спин-спиновое взаимодействие (ССВ)	7	14	2	2	4		Критическое коллективное обсуждение

15	Способы упрощения сложных спектров ЯМР	7	15	2	2	4		Консультация по индивидуальному проекту
16	Метод ЯМР ^{13}C . Химические сдвиги	7	16	2	4	6		Критическое коллективное обсуждение
17	Константы ССВ. Методы развязки от протонов	7	17	2	2	4		Устный отчёт
18	Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Применение метода ЯМР	7	18	2	4	6		Реферат. Коллоквиум по методу ЯМР Защита индивидуального проекта
	Промежуточная аттестация	7					36	Экзамен
	Итого 216 часов			36	54	90	36	

Содержание дисциплины

1. *Понятие о физических методах анализа и исследования.* Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Дифракционные и спектроскопические методы. Соотношение интенсивностей атомного рассеяния в дифракционных методах. Прямая и обратная задачи метода. Некорректность постановки обратных задач.

Основы молекулярной спектроскопии. Области электромагнитного спектра и процессы, происходящие при поглощении и излучении. Радиационные и нерадиационные переходы. Частота и энергия перехода. Заселённость энергетических уровней. Однофотонные переходы. Ширина линии и факторы, на нее влияющие. Характеристическое время метода и его связь с типом изучаемого процесса.

Двухфотонные переходы. Рэлеевское и комбинационное рассеяние света. Правила отбора для одно- и двухфотонных переходов.

Интенсивность спектральных линий поглощения и испускания.

2. *Методы колебательной спектроскопии.*

Инфракрасная (ИК) спектроскопия. Простое гармоническое движение атомов в молекуле. Силовые постоянные. Квантовомеханический подход к описанию колебательных частот, учёт ангармоничности. Кривые потенциальной энергии. Колебательные уровни. Правила отбора в ИК спектроскопии. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Нормальные колебания. Обертоны. Составные и разностные частоты. Резонанс Ферми. Интенсивность полос колебательных спектров.

3. *Нормально-координатный анализ.* Понятие об обратной колебательной задаче. Секюлярный колебательный детерминант. Внутренние (естественные) координаты. Нормальные координаты. Взаимодействие колебаний. Проблема неоднозначности при нахождении силового поля молекулы. Использование изотопических разновидностей молекул.

Концепция групповых колебаний и её ограничения. Симметрия колебаний.

4. *Спектроскопия по отражению. Метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО).*

Применение ИК спектроскопии.

5. *Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР).* Интенсивности линий в спектрах КР. Правила отбора. Степень деполяризации полос в спектрах КР и отнесение полос по симметрии нормальных колебаний. Применение спектроскопии КР.

Сравнение методов ИК и КР спектроскопии.

6. *Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.* Термы. Молекулярные постоянные. Прогрессии, секвенции.

Принцип Франка – Кондона. Зависимость электронно-колебательного спектра двухатомной молекулы от взаимного расположения потенциальных кривых комбинирующих электронных состояний.

7. *Электронная абсорбционная спектроскопия многоатомных молекул.* Характеристики электронных состояний: квантовые числа, мультиплетность, симметрия. Номенклатура электронных состояний. Классификация электронных переходов по Каша и Малликену. Критерии отнесения переходов к тому или иному типу. Переходы с переносом заряда.

Основные характеристики полосы поглощения: полуширина, фактор асимметрии, интегральная интенсивность. Сила осциллятора. Время жизни возбуждённого состояния.

8. Правила отбора. Разрешённые и запрещённые переходы. Причины снятия запрета. Концепция хромофоров и ауксохромов.

Применение электронной абсорбционной спектроскопии.

9. Линейная, круговая и эллиптическая поляризация света. *Спектры оптического кругового дихроизма (КД).* Разностное циркулярно-дихроичное поглощение, эллиптичность. Характеристики дихроичной полосы.

Вращательная сила электронного перехода, её связь с симметрией молекулы.

10. *Дисперсия оптического вращения (ДОВ).* Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света, необходимые условия. Удельное и молекулярное вращение.

Плавные кривые ДОВ. Уравнение Друде. Аномальные кривые ДОВ. Эффект Коттона. Характеристики аномальной кривой ДОВ. Взаимное расположение кривых поглощения, ДОВ и КД отдельного хромофора. Схема эксперимента ДОВ и КД. Применение методов ДОВ и КД. Закономерности получения химической информации. Преимущества и недостатки методов.

11. *Эффект Фарадея.* Уравнение Верде. Постоянная Верде. Закон аддитивности Верде. Взаимное расположение кривых поглощения, дисперсии магнитного вращения, магнитного кругового дихроизма. Парамагнитный и диамагнитный эффект Коттона, его знак. Применение эффекта Фарадея.

12. *Ядерный магнитный резонанс (ЯМР).* Модель вращающегося заряда. Магнитный момент ядра и угловой момент количества движения. Гиромагнитное отношение. Переходы между зеемановскими уровнями. Основное уравнение ЯМР. Ларморова прецессия.

Схема эксперимента ЯМР. Способы достижения условий резонанса. Основные узлы спектрометра ЯМР. Характер образцов, растворители. Чувствительность метода ЯМР и разрешающая способность спектрометра.

Заселённость зеемановских уровней. Спин-решёточная и спин-спиновая релаксация.

13. Химический сдвиг. Влияние электронной плотности, магнитно-анизотропных групп, среды на химические сдвиги протонов. ASIS-Эффекты.

14. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ). Константа ССВ. Спектры первого порядка. Число компонент мультиплетов, распределение интенсивностей. Зависимость констант ССВ от числа и характера связей между взаимодействующими протонами, от геометрических параметров молекул.

15. Способы упрощения сложных спектров. Двойной резонанс и его виды. Шифт-реагенты.

16. Метод ЯМР ^{13}C . Химические сдвиги, влияние на них электронной плотности, пространственных факторов, «эффекта тяжёлого атома» и природы растворителя.

17. Константы ССВ. Использование констант ССВ ^{13}C -H для оценки s-характера связи.

Методы развязки от протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.

18. Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Химические сдвиги. Константы ССВ, их использование для получения структурной информации.

Применение метода ЯМР: структурный анализ, расчёт термодинамических параметров, изучение кинетики конформационных переходов и обменных реакций, и др. «Эффект

передачи насыщения». 2D-Спектроскопия. COSY, NOESY, HSQC и др. Ограничения метода ЯМР.

Структура лабораторных занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)
1	2	3	4
1	Интерпретация электронных абсорбционных спектров в УФ и видимой областях	1-3	Отчёт по лабораторным работам. Проверка оформления лабораторного журнала
2	Интерпретация ИК и КР спектров, решение структурных задач химии	4-7	Отчёт по лабораторным работам. Проверка оформления лабораторного журнала
3	Интерпретация спектров ЯМР ¹ H, решение структурных задач химии	8-11	Отчёт по лабораторным работам. Проверка оформления лабораторного журнала
4	Решение структурно-химических задач при совместном использовании электронной, ИК и ЯМР спектроскопии	12-15	Отчет по лабораторным работам. Проверка оформления лабораторного журнала
5	Интернет-поиск информации о возможностях физических методов для химических исследований	16	Критическое коллективное обсуждение
6	Защита индивидуального проекта	17, 18	Критическое коллективное обсуждение и оценка индивидуального проекта

Содержание лабораторных занятий

1. Интерпретация электронных абсорбционных спектров в УФ и видимой областях. Отнесение электронных переходов к тому или иному типу. Изучение электронного строения молекул (ππ- и ππ-сопряжение). Хромофоры и ауксохромы. Правила Вудворда. Влияние заряда атомной группы в молекуле на энергию перехода. Стерические эффекты. Проявление геометрической и конформационной изомерии в электронных спектрах. Неспецифическое и специфическое влияние растворителей. Оценка положения равновесия.

2. Интерпретация ИК и КР спектров. Идентификация соединений методом «отпечатков пальцев». Сопоставление спектров со структурой. Установление наличия в молекулах структурных элементов, функциональных групп. Различие между колебательными спектрами *цис*- и *транс*-изомеров ненасыщенных соединений. Зависимость частоты поглощения от напряженности цикла. Влияние сопряжения на поглощение в ИК области. Исследование межмолекулярной и внутримолекулярной водородной связи. Влияние растворителей на ИК

спектры. Изучение таутомерии и контроль протекания реакций. Получение структурной информации по данным совместного анализа ИК и КР спектров.

3. Интерпретация спектров ЯМР ^1H . Сопоставление спектров со структурой. Установление строения молекул по числу, химическим сдвигам, мультиплетности, интегральным интенсивностям сигналов в ЯМР спектрах. Использование двойного резонанса для отнесения сигналов. Влияние дейтерирования на спектры. Таутомерия. Изучение обменных процессов методом спектроскопии ЯМР. Контроль протекания химических реакций.

4. Решение структурно-химических задач при совместном использовании электронной, ИК и ЯМР спектроскопии.

5. Написание и защита индивидуального проекта (реферата оригинальной публикации по решению химических задач физическими методами).

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

При освоении дисциплины применяются следующие образовательные технологии:

- Технология развития критического мышления.
- Технология проблемного обучения.
- Информационно-коммуникационные технологии.

В процессе освоения дисциплины студент готовит и по завершении – защищает индивидуальный проект (инновационный отчёт).

При его подготовке и защите используются следующие образовательные технологии:

- Технология развития критического мышления.
- Проектная технология.
- Технология проблемного обучения.
- Информационно-коммуникационные технологии.

Предусмотрены образовательные технологии для студентов с ограниченными возможностями здоровья и инвалидностью:

- индивидуальные консультации в дистанционном режиме по электронной почте, в социальных сетях Facebook и МойМир;
- обсуждение в интерактивном режиме электронных ресурсов по учебной дисциплине, представленных в разделе 8б «Программное обеспечение и Интернет-ресурсы».

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Самостоятельная работа студентов включает:

- изучение литературы;
- поиск в сети Интернет веб-ресурсов с применением поисковых систем, электронно-библиотечных систем, электронных библиотек, информационных сетей, баз данных, серверов издательств научной литературы (прежде всего поиск информации о применении физических методов анализа и исследования для решения интерпретационных задач химии, в том числе при подготовке индивидуального проекта);
- самостоятельное изучение теоретических основ физических методов анализа и исследования в ходе подготовки к устному отчёту, коллоквиумам по ИК и КР, электронной спектроскопии, ДОВ и КД, эффекту Фарадея, спектроскопии ЯМР;
- оформление результатов лабораторных работ, подготовку к отчётам по лабораторным работам;
- выполнение индивидуальных заданий по интерпретации электронных, колебательных, ЯМР спектров;

- подготовку к защите индивидуального проекта с презентацией, раскрывающих основные научные результаты, полученные с помощью физических методов анализа и исследования.

Для самостоятельной работы студентов в Зональной научной библиотеке имени В.А. Артисевич СГУ имеется современная учебно-методическая литература, отражённая в электронном каталоге библиотеки, доступном в сети Интернет.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины включают:

- устные отчёты по теории методов, отчёты по лабораторным работам;
- критические коллективные обсуждения;
- три коллоквиума, в которых суммируются теоретические и практические знания по электронной, колебательной и ЯМР спектроскопии;
- выставление оценок «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» за отдельные виды работы («рейтинговая система»);
- подготовку и защиту индивидуальных проектов с представлением презентации, иллюстрирующей фундаментальные основы, достоинства, недостатки и применение конкретных физических методов для решения научной задачи.

Форма итогового контроля – экзамен.

Вопросы по учебной дисциплине, предназначенные для самостоятельной работы студентов, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведены ниже при характеристике экзамена как формы промежуточной аттестации.

Реферат

Написание реферата является одним из механизмов отработки первичных навыков научно-исследовательской работы, контроля способности обобщать и систематизировать данные из разнообразных разделов учебной дисциплины. Тему реферата студент выбирает самостоятельно из предложенного списка (см. ниже).

Требования к структуре и содержанию реферата

Реферат должен включать следующие структурные элементы: название темы, содержание работы (оглавление), введение, цель работы, аналитический обзор существующих представлений и фактов с цитированием литературы и электронных источников (основная содержательная часть), заключение (выводы по проделанной работе), список использованных источников с полным библиографическим описанием.

Методические рекомендации для подготовки реферата

Во введении должны быть: обозначена проблема, обоснована ее актуальность, дана краткая характеристика используемых в работе научных публикаций и других источников, четко сформулированы цель и задачи работы. В заключительной части обязательно наличие основных результирующих выводов. Только при соблюдении всех указанных требований может оцениваться собственно содержательная часть работы. Студент должен не просто предложить реферативный материал, но также продемонстрировать умение анализировать учебную и научную литературу.

При подготовке реферата необходимо использовать учебники, монографии, а также периодическую литературу, находимую с помощью Реферативного журнала «Химия» и сети Интернет. Ниже приведены некоторые информационные ресурсы для поиска.

Поисковые системы (Yandex, Rambler, Google, Yahoo! Directory, ResearchGate, Scirus, SciSeek, Science Online, ВИНТИ РАН, IngentaConnect, EBSCO Publishing, ScienceDirect,

SpringerLink, Blackwell Synergy, Oxford Journals, J-STAGE, Japan Science and Technology Information Aggregator, Electronic, PubMed Central, MavicaNET, PitBossAnnie.Com, What's Been Published Database и др.);

электронно-библиотечные системы (ЛАНЬ, ZNANIUM.com (ИД «ИНФРА-М»), ЮРАЙТ, АЙБУКС, РУКОНТ, IPRBOOKS, BOOK.ru);

электронные библиотеки, информационные сети, базы данных и научно-образовательные порталы (Web of Science, РИНЦ, NIST Chemistry WebBook, Spectral Database for Organic Compounds (SDBS), WorldWideScience.org, The Global Science Gateway, ChemBioFinder.Com, Scientific Database Gateway, ChemPort.Ru, ХиМиК.ru, Ivan's Bookmarks: Chemistry, Элементы большой науки, РУБРИКОН, Крупнейший энциклопедический ресурс Интернета, Энциклопедия «Кругосвет», Мир энциклопедий, Wikipedia, The Free Encyclopedia, Encyclopaedia Britannica, Columbia Encyclopedia, encyclopedia.com, High-Beam Research, INFORMATIONSPHERE.com, JRank, Online Encyclopedia, ChemWeb.com, Scientific.ru, SCImago Journal & Country Rank (SJR), Фундаментальная экология, Научно-образовательный портал, EсоPages.ru, Он-лайн база данных Министерства природных ресурсов Российской Федерации и др.);

сервера издательств научной литературы (Elsevier Science, Springer Science + Business Media, Wiley, Wiley InterScience, Wiley-VCH, Wiley-Blackwell, Taylor & Francis Inc., Blackwell Publishing, Emerald Group Publishing Limited, Nova Science Publishers, Inc., Lippincott Williams & Wilkins, Mary Ann Liebert, Inc. Publishers, CRC Press, The MIT Press, The American Chemical Society, NRC Research Press, The Royal Society of Chemistry, CSIRO Publishing, RSNZ Publishing, Cambridge University Press, Cambridge Scientific Abstracts, Oxford University Press, Imperial College Press, Allen Press Inc., Bentham Science Publishers Ltd, Internet Scientific Publications, LLC, IOS Press, Freund Publishing House Ltd., R. Oldenbourg GmbH & Co KG, Sage Publications, Sage Science Press, S. Karger AG, Basel, Thieme, Thieme Chemistry, Vieweg + Teubner, Annual Reviews, Begell House, Inc., Birkhäuser, Brill Academic Publishers, EDP Sciences, Portland Press, Walter de Gruyter GmbH & Co., AOAC International Publications, Pharmaceutical Press, Cell Press, Международная Академическая Издательская Компания (МАИК) Наука / Интерпериодика, Наука, Академиздатцентр РАН, Издательский центр «Академия», Издательско-книготорговый Центр «Академкнига», Книжный дом «Университет», Издательство Сибирского отделения РАН, Всероссийский институт научной и технической информации (ВИНИТИ), Мир, Просвещение, Научный мир, Издательство научно-технической литературы «Научтехлитиздат», Физматлит, Факториал, БИНОМ. Лаборатория знаний, Гардарики, Интелтек Плюс, Професионал, Новая волна, Крисмас+, Фолиум Медицина, Интермедика, Пищевая промышленность, Новые технологии, Машиностроение, Руда и металлы, Беларуская навука, Наукова думка и др.).

Темы рефератов для самостоятельной работы

1. Прямые и обратные задачи физических методов исследования.
2. Значение физических методов для получения химической информации.
3. Возможности молекулярной спектроскопии для получения химической информации.
4. Зависимость типа изучаемого процесса от характеристического времени метода.
5. Правила отбора в молекулярных спектрах.
6. Взаимодополняющие методы колебательной спектроскопии.
7. Возможности инфракрасной спектроскопии для химических исследований.
8. Возможности спектроскопии комбинационного рассеяния для химических исследований.
9. Нормально-координатный анализ.
10. Концепция групповых колебаний, возможности и ограничения.
11. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.

12. Принцип Франка – Кондона и его роль в электронно-колебательной спектроскопии.
13. Электронные переходы в молекулах неорганических, органических и координационных соединений.
14. Внутримолекулярный и межмолекулярный перенос заряда: сущность явления и спектроскопические проявления.
15. Причины снятия запрета по симметрии в электронных абсорбционных спектрах.
16. Типы хромофоров в молекулах неорганических, органических и координационных соединений.
17. Возможности электронной абсорбционной спектроскопии для химических исследований.
18. Дисперсия оптического вращения и оптический круговой дихроизм как эффективные методы исследования оптически активных веществ.
19. Эффект Фарадея как физический метод исследования в химии.
20. Возможности ядерного магнитного резонанса для химических исследований.
21. Химический сдвиг в спектрах ЯМР как источник химической информации.
22. Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ЯМР как источник химической информации.
23. Релаксационные процессы в ЯМР как источник химической информации.
24. Методы двойного резонанса в ЯМР.
25. Шифт-реагенты в ЯМР.
26. Ядерный эффект Оверхаузера.
27. Двумерная спектроскопия ЯМР.
28. Структурный анализ с помощью метода ЯМР.
29. Изучение конформационных переходов и обменных процессов методом ЯМР.
30. Корреляционная спектроскопия ЯМР.

Вопросы к коллоквиумам

Тема «Колебательная спектроскопия»

1. Инфракрасная (ИК) спектроскопия.
2. Нормально-координатный анализ.
3. Концепция групповых колебаний и отнесение полос.
4. Спектроскопия по отражению.
5. Метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО).
6. Применение ИК спектроскопии.
7. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР).
8. Применение спектроскопии КР.
9. Противоположный характер активности колебаний в спектрах ИК и КР.
10. Сравнение методов ИК и КР спектроскопии.

Тема «Электронная спектроскопия»

1. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
2. Электронная абсорбционная спектроскопия многоатомных молекул.
3. Правила отбора в электронной спектроскопии.
4. Концепция хромофоров и ауксохромов.
5. Применение электронной абсорбционной спектроскопии.
6. Спектры оптического кругового дихроизма (КД).
7. Дисперсия оптического вращения (ДОВ).

8. Применение методов ДОВ и КД.
9. Эффект Фарадея и его применение в химии.

Тема «Ядерный магнитный резонанс»

1. Модель вращающегося заряда.
2. Явление ядерного магнитного резонанса (ЯМР).
3. Основное уравнение ЯМР.
4. Метод ЯМР ^1H .
5. Спин-решёточная и спин-спиновая релаксация.
6. Химический сдвиг.
7. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ).
8. Способы упрощения сложных спектров ЯМР.
9. Двойной резонанс.
10. Шифт-реагенты.
11. Метод ЯМР ^{13}C .
12. Способы развязки от протонов в методе ЯМР ^{13}C .
13. Спектроскопия ЯМР ^{15}N .
14. Спектроскопия ЯМР ^{19}F .
15. Спектроскопия ЯМР ^{31}P .
16. Применение метода ЯМР.

Индивидуальный проект (см. таблицу «Структура лабораторных занятий» п. 6)

Цель индивидуального проекта: закрепить у студентов навыки самостоятельного применения теоретических и практических аспектов изученной учебной дисциплины.

Задачи индивидуального проекта сформулированы в его описании.

Постановка цели, выбор стратегии и путей решения научной задачи в области химии с помощью физических методов анализа и исследования на основе реферата оригинальной публикации или серии публикаций

Студенту необходимо выбрать оригинальную публикацию или серию публикаций (из числа работ последних 10 лет), посвящённых решению той или иной научной химической задачи. Студент должен проанализировать суть решаемой проблемы, цель работы, постановку задач, методы исследования, основные результаты, выводы.

На базе проведенного критического анализа студенту следует самостоятельно поставить цель и задачи будущего оригинального исследования в области химии (текущая научно-исследовательская или квалификационная (выпускная) работа бакалавра).

Далее нужно представить реферат оригинальной публикации или серии публикаций, выводы, прогнозы, постановку цели и задач, вытекающие из этого реферата, в виде отчета и защитить этот индивидуальный проект.

Если студент имеет собственные научные результаты по названным или смежным аспектам, возможно оформление и защита работы по данным своих исследований.

Примерный перечень журналов для реферирования публикаций по химии: *Агрохимия, Акустический журнал, Биологические мембраны, Биоорганическая химия, Биотехнология, Биохимия, Вестник Московского университета. Серия 2. Химия, Высокомолекулярные соединения, Геохимия, Доклады Академии наук, Журнал аналитической химии, Журнал неорганической химии, Журнал общей химии, Журнал органической химии, Журнал прикладной спектроскопии, Журнал прикладной химии, Журнал структурной химии, Журнал физической химии, Заводская лаборатория. Диагностика материалов, Известия высших учебных заведе-*

ний. *Химия и химическая технология, Известия Академии наук. Серия химическая, Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика, Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология, Кинетика и катализ, Коллоидный журнал, Координационная химия, Кристаллография, Микробиология, Молекулярная биология, Неорганические материалы, Нефтехимия, Оптика и спектроскопия, Почвоведение, Приборы и техника эксперимента, Прикладная биохимия и микробиология, Российский химический журнал (Журнал Российского химического общества им. Д.И. Менделеева), Сенсорные системы, Теоретическая и экспериментальная химия, Теоретические основы химической технологии, Украинский химический журнал, Успехи химии, Физика металлов и металловедение, Физика плазмы, Физикохимия поверхности и защита материалов, Химико-фармацевтический журнал, Химическая физика, Химическая физика и мезоскопия, Химия высоких энергий, Химия гетероциклических соединений, Химия природных соединений, Химия и технология воды, Экологическая химия, Электрохимия.*

По желанию студентов может быть выбрана статья в зарубежном или международном химическом журнале, или же статья химического содержания в журнале иной направленности.

Список вопросов к устному экзамену

1. Понятие о физических методах исследования. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Дифракционные и спектроскопические методы. Прямая и обратная задачи метода.
2. Молекулярная спектроскопия. Области электромагнитного спектра и процессы, происходящие при поглощении и излучении.
3. Радиационные и нерадиационные переходы. Частота и энергия перехода. Заселённость энергетических уровней. Однофотонные переходы. Ширина линии и факторы, на неё влияющие. Характеристическое время метода и его связь с типом изучаемого процесса.
4. Двухфотонные переходы. Рэлеевское и комбинационное рассеяние света. Правила отбора для одно- и двухфотонных переходов.
5. Интенсивность спектральных линий поглощения и испускания.
6. Методы колебательной спектроскопии. Инфракрасная (ИК) спектроскопия. Простое гармоническое движение атомов в молекуле. Силовые постоянные. Квантовомеханический подход к описанию колебательных частот, учёт ангармоничности. Кривые потенциальной энергии. Колебательные уровни. Правила отбора в ИК спектроскопии. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Нормальные колебания. Обертоны. Составные и разностные частоты. Резонанс Ферми. Интенсивность полос колебательных спектров.
7. Понятие о нормально-координатном анализе. Взаимодействие колебаний. Проблема неоднозначности при нахождении силового поля молекулы. Использование изотопических разновидностей молекул.
8. Концепция групповых колебаний и её ограничения. Симметрия колебаний.
9. Спектроскопия по отражению. Метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО).
10. Применение ИК спектроскопии.
11. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Интенсивности линий в спектрах КР. Правила отбора. Степень деполяризации полос в спектрах КР и отнесение полос по симметрии нормальных колебаний. Применение спектроскопии КР.
12. Сравнение методов ИК и КР спектроскопии.
13. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Термы. Молекулярные постоянные. Прогрессии, секвенции.
14. Принцип Франка – Кондона. Зависимость электронно-колебательного спектра двухатомной молекулы от взаимного расположения потенциальных кривых комбинирующих электронных состояний.

15. Абсорбционная электронная спектроскопия многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний: квантовые числа, мультиплетность, симметрия. Классификация электронных переходов. Критерии отнесения переходов к тому или иному типу. Переходы с переносом заряда.

16. Основные характеристики полосы поглощения: полуширина, фактор асимметрии, интегральная интенсивность. Сила осциллятора. Правила отбора. Разрешённые и запрещённые переходы. Причины снятия запрета.

17. Концепция хромофоров и ауксохромов.

18. Применение электронной абсорбционной спектроскопии.

19. Линейная, круговая и эллиптическая поляризация света. Спектры оптического кругового дихроизма (КД). Вращательная сила электронного перехода, ее связь с симметрией молекулы.

20. Дисперсия оптического вращения (ДОВ). Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света, необходимые условия. Плавные кривые ДОВ. Уравнение Друде. Аномальные кривые ДОВ. Эффект Коттона. Характеристики аномальной кривой ДОВ. Взаимное расположение кривых поглощения, ДОВ и КД отдельного хромофора. Схема эксперимента ДОВ и КД. Применение методов ДОВ и КД. Закономерности получения химической информации. Преимущества и недостатки методов.

21. Эффект Фарадея. Уравнение Верде. Постоянная Верде. Закон аддитивности Верде. Взаимное расположение кривых поглощения, дисперсии магнитного вращения, магнитного кругового дихроизма. Парамагнитный и диамагнитный эффект Коттона, его знак. Применение эффекта Фарадея.

22. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Модель вращающегося заряда. Магнитный момент ядра и угловой момент количества движения. Гиромагнитное отношение. Переходы между зеемановскими уровнями. Основное уравнение ЯМР. Ларморова прецессия. Схема эксперимента ЯМР. Способы достижения условий резонанса. Основные узлы спектрометра ЯМР. Характер образцов, растворители.

23. Заселённость зеемановских уровней. Спин-решёточная и спин-спиновая релаксация.

24. Химический сдвиг. Влияние электронной плотности, магнитно-анизотропных групп, среды на химические сдвиги протонов. ASIS-Эффекты.

25. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ). Константа ССВ. Спектры первого порядка. Число компонент мультиплетов, распределение интенсивностей. Зависимость констант ССВ от числа и характера связей между взаимодействующими протонами, от геометрических параметров молекул.

26. Способы упрощения сложных спектров. Двойной резонанс и его виды. Шифт-реагенты.

27. Метод ЯМР ^{13}C . Химические сдвиги, влияние на них электронной плотности, пространственных факторов, «эффекта тяжёлого атома» и природы растворителя.

28. Константы ССВ. Использование констант ССВ ^{13}C -H для оценки s-характера связи.

29. Методы развязки от протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.

30. Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Химические сдвиги. Константы ССВ, их использование для получения структурной информации.

31. Применение метода ЯМР: структурный анализ, расчёт термодинамических параметров, изучение кинетики конформационных переходов и обменных реакций, и др. «Эффект передачи насыщения». 2D-Спектроскопия.

7. Данные для учёта успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
7	20	20	0	20	0	0	40	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

Семестр 7

Лекции

Посещаемость, участие в диалоге с преподавателем – от 0 до 20 баллов (посещение – 12 баллов, участие в диалоге – 8 баллов).

Лабораторные занятия

Посещаемость и работа на занятии – от 0 до 20 баллов (посещение – 8 баллов, самостоятельность и активность работы на занятиях – 12 баллов).

Практические занятия

Не предусмотрены.

Самостоятельная работа

Подготовка и презентация рефератов по индивидуальным темам – от 0 до 20 баллов (информационная насыщенность и глубина обсуждения проблемы – до 5 баллов, структурированность доклада, степень отражения в нем сущности проделанной работы – до 5 баллов, ответы на вопросы – до 5 баллов, качество презентации – до 5 баллов).

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено.

Другие виды учебной деятельности

Не предусмотрены.

Промежуточная аттестация

От 0 до 40 баллов.

Промежуточная аттестация проводится в виде экзамена. В качестве критерия для начисления баллов принята градация, обычно используемая для экзамена. Ответ, соответствующий оценке «отлично», оценивается в 30-40 баллов; оценке «хорошо» – в 20-29 баллов; оценке «удовлетворительно» – в 10-19 баллов; оценке «неудовлетворительно» – в 0-9 баллов.

Максимально возможная сумма баллов по всем видам учебной деятельности студента за седьмой семестр по дисциплине «Физические методы анализа и исследования» составляет 100 баллов.

Таблица 2.2. Таблица пересчёта полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Физические методы анализа и исследования» в оценку (экзамен)

Сумма баллов, набранных студентом по итогам изучения дисциплины	0-54 баллов	55-69 баллов	70-79 баллов	80-100 баллов
Оценка	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	отлично

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) Литература

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных / Пер. с англ. Б.Н. Тарасевича. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 438 с. (33 экз.)
2. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 398 с. (56 экз.)
3. Панкратов А.Н. Избранные главы электрохимии органических соединений. Ионные жидкости. Саратов: Изд-во Саратовск. ун-та, 2011. 132 с. (108 экз.)
4. Каныгина О.Н., Бердинский В.Л., Четверикова А.Г. Физические методы исследования веществ. Оренбург: Оренбургск. гос. ун-т, 2014. 141 с. (ЭБС «РУКОНТ»).
5. Ярышев Н.Г., Медведев Ю.Н., Токарев М.И., Бурихина А.В., Камкин Н.Н. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе. М.: Прометей, 2015. 196 с. (ЭБС «IPRBOOKS»).
6. Луков В.В., Щербаков И.Н. Физические методы исследования в химии. Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федеральн. ун-та, 2016. 216 с. (ЭБС «РУКОНТ»).
7. Евстигнеев М.П. Основы ядерного магнитного резонанса. М.: Вузовский учебник, 2015. 247 с. (ЭБС «ZNIANIUM.com» (ИД «ИНФРА-М»)).
8. Шмидт Ф.К. Методы синергетики в каталитической химии (самоорганизация химических систем). Иркутск: Изд-во Иркутск. ун-та, 2001. 195 с. (ЭБС «РУКОНТ»).
9. Панкратов А.Н. Кислоты и основания в химии. Саратов: Изд-во Саратовск. ун-та, 2006. 196 с. (104 экз.)

б) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. Лицензионное программное обеспечение:
 - операционная система Windows и включённые в её состав программы, не предусматривающие отдельного лицензирования (Paint, почтовый клиент Outlook Express и др.);
 - программы, входящие в Microsoft Office (Microsoft Word, Microsoft Excel, Microsoft PowerPoint и др.);
 - редактор химических формул ChemBio3D Ultra 11.0 with MOPAC.
2. Программное обеспечение, не требующее лицензирования:
 - Интернет-браузеры (Google Chrome, Mozilla Firefox и др.);
 - Adobe Reader;
 - Foxit Reader;
 - редактор химических формул ISIS/Draw;
 - почтовый клиент Mozilla Thunderbird.
3. Институт химии Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского. [Электронный ресурс]. URL: <https://sgu.ru/structure/chemical>; <https://www.sgu.ru/structure/chemical>.
4. Зональная научная библиотека имени В.А. Артисевич Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского. [Электрон

ный ресурс]. URL: library.sgu.ru; <https://sgu.ru/structure/znbsgu>;
<https://www.sgu.ru/structure/znbsgu>.

5. Хим. блок – всё о химии // fptl.ru, Химико-фармацевтическая академия, биотехнологический факультет. [Электронный ресурс]. URL: <http://fptl.ru/Chem%20block.html>;
<http://www.fptl.ru/Chem%20block.html>.

6. Книги по химии. Основные учебники, практикумы и справочники по химии // Химия и Химики – журнал Химиков-Энтузиастов. [Электронный ресурс]. URL: <http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html>; <http://www.chemistry-chemists.com/Uchebniki.html>.

7. Химия // NeHudLit.ru, НеХудожественная Литература. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.nehudlit.ru/books/subcat352.html>.

8. Химик, Сайт о химии. [Электронный ресурс]. URL: <http://xumuk.ru>;
<http://www.xumuk.ru>.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Оверхед-проектор и прозрачные плёнки.
2. Мультимедийный проектор и ноутбук.
3. Поисковые системы; электронно-библиотечные системы; электронные библиотеки, информационные сети, базы данных и научно-образовательные порталы; сервера издательств научной литературы и другие информационные ресурсы.
4. Оттиски и ксерокопии научных статей.
5. Рисунки электронных, ИК, ЯМР спектров.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 04.03.01 «Химия» и профилю подготовки «Аналитическая химия и химическая экспертиза».

Автор
профессор

А.Н. Панкратов

Программа одобрена на заседании кафедры аналитической химии и химической экологии от 10 сентября 2019 года, протокол № 2.