

Документ подписан простой электронной подписью.
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 13.06.2024 14:42:31
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ХАНТЫ-МАНСКИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА – ЮГРЫ
«Сургутский государственный университет»**

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебно-методической работе

Е.В. Коновалова

16 июня 2022 г. протокол УМС №6

**ФАКУЛЬТАТИВНЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ
Физико-химические методы исследования
рабочая программа дисциплины (модуля)**

Закреплена за кафедрой **Химии**

Шифр и наименование
научной специальности **1.4.4. Физическая химия**

Форма обучения **очная**

Часов по учебному плану 72
в том числе:
аудиторные занятия 32
самостоятельная работа 40

Вид контроля: **зачет**

Распределение часов дисциплины

Курс	2	
Вид занятий	уп	рп
Лекции	16	16
Практические	16	16
Итого ауд.	32	32
Контактная работа	32	32
Сам. работа	40	40
Итого	72	72

Программу составил(и):

канд. физ.-мат. наук, доцент, Туров Юрий Прокопьевич

Рабочая программа дисциплины

Физико-химические методы исследования

разработана в соответствии с ФГТ:

Приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 г. №951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)".

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Протокол от 04.04.2022 г. № 24

И.о. зав. кафедрой, *канд. хим. наук Крайник В.В.*

Председатель УМС (УС) института естественных и технических наук

Директор института, канд. хим. наук, доцент Петрова Ю.Ю.

Протокол от 15 апреля 2022 г. № 5

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	
1.1	Освоение и изучение основных современных физико-химических методов установления структуры органических и высокомолекулярных соединений и анализа состава смесей, приобретение знаний, умений и практических навыков в применении физических методов исследования при проведении эксперимента, наблюдений, измерений, а также систематизации и представления результатов изучения состава веществ и материалов.
1.2	Дисциплина призвана помочь аспирантам продолжить более глубокое изучение физико-химических методов исследования с учетом последних достижений в этой области химической науки и приборостроения в процессе подготовки к научно-исследовательской работе.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП	
2.1	Предшествующими для изучения дисциплины являются:
2.1.1	результаты освоения дисциплин, направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов, «История и философия науки», «Иностранный язык»;
2.1.2	результаты научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;
2.1.3	результаты научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций.
2.2	Последующими к изучению дисциплины являются знания, умения и навыки, используемые
2.2.1	при освоении специальной дисциплины, направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена;
2.2.2	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;
2.2.3	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций;
2.2.4	при прохождении научно-исследовательской практики;
2.2.5	при прохождении итоговой аттестации.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
В результате освоения дисциплины обучающийся должен	
3.1	Знать:
3.1.1	Основы проведения химического эксперимента с использованием физических методов исследования веществ и материалов;
3.1.2	Вычислительные методы и алгоритмы для обработки данных химического эксперимента;
3.1.3	Принципиальные возможности физических методов в решении химических проблем вне зависимости от их практических возможностей
3.2	Уметь:
3.2.1	Спланировать и осуществить химический эксперимент при исследовании состава вещества;
3.2.3	Проводить структурный анализ органических и высокомолекулярных соединений по данным УФ, ИК, ЯМР и масс- спектрометрии
3.3	Владеть:
3.3.1	Основами методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса (на ядрах ^1H и ^{13}C), масс-спектрометрии и совместным использованием всех методов;
3.3.2	Навыками работы по предлагаемым методикам с использованием физико-химических методов исследования для решения задач профессиональной деятельности

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)					
Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Курс	Часов	Литература	Примечание
	Раздел 1. Электронная УФ спектроскопия				
1.1	Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера. /Лек/	2	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	

1.2	Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра. /Пр/	2	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
1.3	Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипсохромный и гиперхромный эффекты. /Ср/	2	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
	Раздел 2. Колебательная ИК спектроскопия				
2.1	Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двух-атомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия. /Лек/	2	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
2.2	Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см ⁻¹) /Пр/	2	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
2.3	Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, Cаром–Cаром, Csp ³ –H, Csp ² –H, Csp–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, CO–Hal, NO ₂ , C≡N. /Ср/	2	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
	Раздел 3. Масс-спектрометрия и хроматомасс-спектрометрия				
3.1	Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре. Метастабильные ионы. Методы двойной и кратной масс-спектрометрии (MC/MC, MCn). Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения. /Лек/	2	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	

3.2	Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс- спектрометрии /Пр/	2	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
3.3	Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. Качественные теории масс- спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс- спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным си-темам. /Ср/	2	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
	Раздел 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³С спектроскопии. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия				
4.1	Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин- спинового взаимодействия JH–H. Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³ С, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин- спинового взаимодействия JC–H, полное и частичное подавление спин- спинового взаимодействия ядер ¹³ С и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия. /Лек/	2	8	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
4.2	Совместное использование масс- спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³ С спектроскопии. Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спек-тральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности. /Пр/	2	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
4.3	Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A2, AX, AB и A2B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров /Ср/	2	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	

4.4	/Контр.раб./	2	0	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	
4.5	/Зачёт/	2	0	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8	

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

5.1. Контрольные вопросы и задания

Проведение текущего контроля успеваемости

Тема 1. Электронная УФ спектроскопия

Устный опрос по вопросам:

1. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора
2. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных
3. Принцип работы УФ спектрофотометра

Тематика публичных докладов:

1. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул
2. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра
3. Хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты

Перечень вопросов для аудиторной дискуссии:

1. Насыщенные гетероатомные ауксохромы
2. Карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор
3. Правило Вудворда-Физера

Задание для самостоятельной работы:

Изучение теоретического материала по данной теме, подготовка к устному опросу по вопросам. Подготовка отчета с презентацией по теме 1.

Презентация должна содержать не менее 15 слайдов и отображать следующее содержание:

Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Принцип работы УФ спектрофотометра и проведение измерений

Тематика публичных докладов:

1. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул
2. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра
3. Хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты

Тест:

Выберите один правильный ответ:

1. Как связано волновое число ν с длиной волны λ ?

- 1) $\Delta\lambda = -\Delta\nu$
- 2) $\lambda = \nu$
- 3) $\lambda = 1/\nu$;
- 4) $\lambda = c/\nu^3$
- 5) $\lambda = c/\nu$

2. Наибольшая энергия требуется:

- 1) для возбуждения электронов;
- 2) для возбуждения колебаний атомов в молекуле;
- 3) для возбуждения вращений молекулы;
- 4) для переориентации спинов ядер.

3. При снижении температуры ширина полосы люминесценции

- 1) уменьшается
- 2) увеличивается

- 3) не зависит от температуры

4. При снижении температуры ширина полосы УФ поглощения

- 1) уменьшается
- 2) увеличивается

- 3) не зависит от температуры

5. В основе спектрофотометрических методов лежит:

- 1) избирательное поглощение электромагнитного излучения анализируемым веществом
- 2) испускание электромагнитного излучения возбужденными атомами или молекулами

3) отражение электромагнитного излучения анализируемым веществом

6. Поглощение электромагнитного излучения веществом зависит от:

1) интенсивности светового потока

2) природы вещества

3) толщины поглощающего слоя

4) содержания вещества в анализируемом растворе

7. Спектр поглощения в УФ области представляет собой:

1) графическую зависимость оптической плотности (D)

или молярного коэффициента поглощения (ϵ) от длины волны (λ) падающего света

2) графическую зависимость пропускания (T) от частоты (ν), выраженной в обратных сантиметрах

Тема 2. Колебательная ИК спектроскопия

Устный опрос по вопросам:

1. Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул

2. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний

3. факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности

Задание для самостоятельной работы:

Изучение теоретического материала по данной теме, подготовка к устному опросу по вопросам. Подготовка отчета с презентацией по теме 2.

Презентация должна содержать не менее 15 слайдов и отображать следующее содержание:

Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.

Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область $4000 - 650 \text{ см}^{-1}$).

Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C—C, C=C, C \equiv C, C_{аром}—C_{аром}, C_{sp3}—H, C_{sp2}—H, C_{sp}—H, C—O, C—N, O—H, N—H, S—H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONH, NO₂, C \equiv N

Тема 3. Масс-спектрометрия

Устный опрос по вопросам:

1. Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила

2. Образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии

3. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру

Задание для самостоятельной работы:

Изучение теоретического материала по данной теме, подготовка к устному опросу по вопросам. Подготовка отчета с презентацией по теме 3.

Презентация должна содержать не менее 15 слайдов и отображать следующее содержание:

Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре. Метастабильные ионы. Методы двойной и кратной масс-спектрометрии (МС/МС, МСⁿ). Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии.

Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³C спектроскопии. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия

Устный опрос по вопросам:

1. Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса

2. Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений.

3. Мессбауэровская и рентгеновская спектроскопия

Задание для самостоятельной работы:

Изучение теоретического материала по данной теме, подготовка к устному опросу по вопросам. Подготовка отчета с презентацией по теме 4.

Презентация должна содержать не менее 15 слайдов и отображать следующее содержание:

Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров.

Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов.

Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности.

Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ¹³C.

Совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ¹³C спектроскопии.

Взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер).

Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H}.

Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.

Проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень вопросов для подготовки к зачету

1. Физические основы методов оптической спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
2. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
3. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера.
4. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.
5. Частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
6. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, COHal, NO₂, C≡N.
7. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.
8. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000–650 см⁻¹).
9. Физические основы метода масс-спектрометрии: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные).
10. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону.
11. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом.
12. Термические реакции в масс-спектрометре. Метастабильные ионы. Методы двойной и кратной масс-спектрометрии (МС/МС, МСⁿ).
13. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом.
14. Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.
15. Физические основы метода ЯМР: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений.
16. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, основные правила анализа спектров.
17. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H}. Двойной резонанс.
18. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера.
19. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ¹³C.
20. Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа.

5.2. Темы письменных работ

Контрольная работа проводится в виде итогового теста по всему учебному материалу дисциплины.

Выберите правильный ответ (в каждом вопросе только один правильный ответ).

Контрольная работа в виде тестовых вопросов:

1. Для возбуждения рентгеновской флуоресценции могут быть использованы
 - 1) рентгеновские лучи
 - 2) гамма-излучение
 - 3) поток быстрых нейтральных частиц
 - 4) поток быстрых заряженных частиц
2. Наибольшая энергия требуется:
 - 1) для возбуждения электронов;
 - 2) для возбуждения колебаний атомов в молекуле;
 - 3) для возбуждения вращений молекулы;
 - 4) для переориентации спинов ядер.
3. Каково соотношение между энергиями электронных E_е, колебательных E_в и вращательных E_р состояний молекулы?
 - 1) E_е > E_в > E_р ;
 - 2) E_в > E_р > E_е ;

- 3) $E_r > E_e > E_v$;
- 4) $E_r > E_v > E_e$.
4. При рассмотрении спектров какого типа необходимо учитывать принцип Франка-Кондона?
 - 1) ИК-
 - 2) вращательных
 - 3) КР-
 - 4) электронных
5. В каких областях спектра проявляются переходы между электронными, колебательными и вращательными состояниями молекул?
 - 1) Колебательные – в ИК-области, вращательные – в УФ-области, электронные – в микроволновой.
 - 2) Колебательные – в микроволновой, электронные – в УФ-области, вращательные – в ИК-области.
 - 3) Колебательные – в ИК-области, вращательные – в микроволновой, электронные – в УФ-области.
 - 4) Колебательные – в УФ-области, электронные – в ИК-области, вращательные – в микроволновой.
6. Частота валентных колебаний:
 - 1) больше чем частота деформационных колебаний
 - 2) меньше чем частота деформационных колебаний
 - 3) больше чем частота деформационных колебаний одной и той же группы молекулы
 - 4) меньше чем частота деформационных колебаний одной и той же группы молекулы
7. Комбинационным рассеянием называется рассеяние света:
 - 1) без изменения частоты
 - 2) с увеличением частоты
 - 3) с уменьшением частоты
 - 4) с изменением частоты.
8. В масс-спектрометрии регистрируют
 - 1) массы атомов
 - 2) массы молекул
 - 3) массы элементарных частиц
 - 4) отношения массы к заряду ионов
9. Наиболее «мягким» способом ионизации в масс-спектрометрии является
 - 1) электронный удар
 - 2) химическая ионизация
 - 3) фотоионизация
 - 4) ионизация в неоднородном электрическом поле (полевая ионизация)
10. Молекулярный ион в масс-спектре – это
 - 1) самый интенсивный
 - 2) имеющий самую большую массу
 - 3) получающийся в результате потери электрона молекулой вещества
11. Изотопный ион в масс-спектре – это
 - 1) ион радиоактивного изотопа элемента
 - 2) ион наиболее легкого изотопа элемента
 - 3) ион наиболее тяжелого изотопа элемента
 - 4) ион, содержащий тяжелые изотопы элементов в своем составе
12. Идентификацию веществ по их масс-спектрам осуществляют
 - 1) сравнивая экспериментальные масс-спектры эталона и неизвестного вещества
 - 2) сравнивая экспериментальный масс-спектр вещества с результатом квантовохимических расчетов
 - 3) сравнивая экспериментальный масс-спектр вещества с библиотечным
 - 4) на основе эмпирических спектро-структурных корреляций
13. Энергетика процессов, отвечающих за появления спектров, минимальна в
 - 1) ИК-спектроскопии
 - 2) УФ-спектроскопии
 - 3) спин-резонансной спектроскопии
 - 4) гамма-резонансной спектроскопии
 - 5) рентгеновской спектроскопии
14. Энергетика процессов, отвечающих за появления спектров, максимальна в
 - 1) ИК-спектроскопии
 - 2) УФ-спектроскопии
 - 3) спин-резонансной спектроскопии
 - 4) гамма-резонансной спектроскопии
 - 5) рентгеновской спектроскопии
15. Спектры ядерного магнитного резонанса можно наблюдать на ядрах
 - 1) H^1
 - 2) H^2
 - 3) C^{12}
 - 4) C^{13}
 - 5) N^{14}
 - 6) N^{15}
16. При фиксированной напряженности магнитного поля резонансное поглощение ядер F^{19} по сравнению с ядрами H^1 наблюдают
 - 1) при одинаковой частоте электромагнитного поля
 - 2) при меньшей частоте электромагнитного поля
 - 3) при большей частоте электромагнитного поля

17.Рентгеновскую флуоресценцию K_{α} линии золота можно возбудить излучением
1) K_{α} линиями излучения трубки с родиевым анодом
2) K_{β} линиями излучения трубки с родиевым анодом
3) излучением коротковолновой части континуума в спектре трубки с родиевым анодом
4) невозможно возбудить излучением трубки с родиевым анодом
18. Наблюдение резонансного поглощения в мессбауэровской спектроскопии основано на учете эффекта
1) Мессбауэра
2) Эйнштейна
3) Допплера
4) Комптона
5) Ньютона
19. При снижении температуры ширина полосы люминесценции
1) уменьшается
2) увеличивается
3) не зависит от температуры
20. Измерять химические сдвиги в спектроскопии ядерного магнитного резонанса принято в
1) теслах
2) герцах
3) относительных единицах
4) миллиметрах
5) мм/с
6) м.д.
21. Измерять химические сдвиги в гамма-резонансной спектроскопии принято в
1) теслах
2) герцах
3) относительных единицах
4) миллиметрах
5) мм/с
6) м.д.
22. Спектр рентгеновской люминесценции химических элементов определяется
1) валентным состоянием элемента
2) типом химической связи
3) строением внутренних электронных оболочек атома или иона
23. Достоинством рентгенофлуоресцентных методов анализа является
1) возможность упрощения пробоподготовки
2) возможность многоэлементного анализа в рамках одного эксперимента
3) возможность проведения неразрушающего анализа
Задание для самостоятельной работы:
Изучение теоретического материала по данной теме, подготовка к устному опросу по вопросам. Подготовка к контрольной работе в виде тестирования знаний по изученным темам дисциплины.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
ЛП.1	Пентин Ю. А., Вилков Л. В.	Физические методы исследования в химии: Учебник для высших учебных заведений	М.: Мир, 2003	5
ЛП.2	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: учебное пособие	Москва: Прометей, 2015, http://www.iprbookshop.ru/58227.html	1
ЛП.3	Преображенская Т.Н., Харлампиди Х.Э., Сафин Д.Х.	Физические методы интенсификации химических процессов: учебное пособие	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2011, http://www.iprbookshop.ru/62333.html	1
ЛП.4	Введенский В. Ю., Лилеев А. С.	Физические методы исследования: Магнитные свойства. Курс лекций	Москва: Издательский Дом МИСиС, 2010, http://www.iprbookshop.ru/56610.html	1

Л1.5	Булатов М. И., Ганеев А. А., Дробышев А. И., Ермаков С. С., Калинин И. П., Москвин Л. Н., Немец В. М., Семенов В. Г., Чижик В. И., Якимова Н. М.	Аналитическая химия. Методы идентификации и определения веществ: учебник	Санкт-Петербург: Лань, 2019, https://e.lanbook.com/book/112067	1
Л1.6	Суворов Э. В.	Дифракционный структурный анализ: Учебное пособие	Москва: Издательство Юрайт, 2019, https://www.biblio-online.ru/bcode/429120	1

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Безрукова Л. П., Баличева Т. Г., Звинчук Р. А.	Физические методы исследования неорганических веществ: учебное пособие для студентов	М.: ACADEMIA, 2006	10
Л2.2	Агеев Е.П., Мельников М. Я., Луний В. В.	Практикум по физической химии. Физические методы исследования: допущено Учебно-методическим объединением по классическому университетскому образованию в качестве учебного пособия для высших учебных заведений, обучающихся по направлению "Химия" и специальности "Химия"	Москва: Издательский центр "Академия", 2014	10
Л2.3	Ярышев Н. Г., Панкратов Д. А., Токарев М. И., Камкин Н. Н., Родякина С. Н.	Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе: Учебное пособие	Москва: Московский педагогический государственный университет, 2012, http://www.iprbookshop.ru/18633	1
Л2.4	Каныгина О. Н., Четверикова А. Г., Бердинский В. Л.	Физические методы исследования веществ: Учебное пособие	Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2014, http://www.iprbookshop.ru/33663	1
Л2.5	Хребтова С.Б., Телешев А.Т., Ярышев Н.Г.	Физические методы исследования вещества. Задания для самостоятельной работы. Часть 1. Спектроскопия ЯМР и ЭП: учебное пособие	Москва: Московский педагогический государственный университет, 2015, http://www.iprbookshop.ru/70160.html	1
Л2.6	Мовчан Н.И., Горбунова Т.С., Евгеньева И.И., Романова Р.Г.	Аналитическая химия. Физико-химические и физические методы анализа: учебное пособие	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2013, http://www.iprbookshop.ru/61958.html	1

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Издания по естественным и техническим наукам, http://www.ebiblioteka.ru/
Э2	Портал фундаментального химического образования России, http://www.chem.msu.ru/
Э3	ACS Publications, http://pubs.acs.org/
Э4	Учебники, практикумы и справочники по химии, http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html
Э5	База данных ВИНТИ РАН http://www.viniti.ru
Э6	Единое окно доступа к образовательным ресурсам - информационная система http://window.edu.ru/
Э7	КиберЛенинка – научная электронная библиотека http://cyberleninka.ru/
Э8	Официальный сайт Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации https://vak.minobrnauki.gov.ru/

6.3.1 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, Пакет прикладных программ Microsoft Office.
---------	---

6.3.2 Перечень информационных справочных систем

6.3.2.1.	Электронно-библиотечные системы:
----------	----------------------------------

	Электронно-библиотечная система Znanium. (Базовая коллекция). www.znanium.com
	Электронно-библиотечная система издательства «Лань». http://e.lanbook.com/
	Электронно-библиотечная система IPRbooks (Базовая коллекция). http://iprbookshop.ru
	Электронная библиотечная система «Юрайт» https://biblio-online.ru/
6.3.2.2.	Современные профессиональные базы данных:
	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (http://www.elibrary.ru)
	Евразийская патентная информационная система (ЕАПАТИС) (http://www.eapatiss.com)
	Национальная электронная библиотека (НЭБ) (nab.ru)
6.3.2.3.	Международные реферативные базы данных научных изданий:
	Web of Science Core Collection http://webofknowledge.com (WoS)
	Архив научных журналов (NEICON). http://archive.neicon.ru
	Электронные книги Springer Nature https://link.springer.com/
	Springer Journals – полнотекстовая коллекция электронных журналов издательства. https://rgub.ru/resource/ebs/
6.3.2.4.	Информационные справочные системы:
	Гарант – информационно-правовой портал (http://www.garant.ru)
	КонсультантПлюс – надежная правовая поддержка (http://www.consultant.ru)

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (лабораторных занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащена: комплект специализированной учебной мебели, маркерная (меловая) доска, комплект переносного мультимедийного оборудования - компьютер, проектор, проекционный экран, компьютеры с возможностью выхода в Интернет и доступом в электронную информационно-образовательную среду. Обеспечен доступ к сети Интернет и в электронную информационную среду организации.
7.2	Лаборатории оборудованы горячим и холодным водоснабжением, канализацией, лабораторными столами, вытяжными шкафами с принудительной вентиляцией, посудой, переносным мультимедийным проектором, сушильным шкафом, электронными аналитическими весами, муфельной печью, дистиллятором, аппаратом для получения воды ОСЧ, газовым хроматографом с ПИД, хроматомасс-спектрометром, высокоэффективным жидкостным хроматографом, прибором для ТСХ с облучателем хроматографическим УФС, набором лабораторной посуды, средствами пожаротушения и первой помощи.
7.3	Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационную образовательную среду СурГУ:
	539,541,542 Зал медико-биологической литературы и литературы по физической культуре и спорту
	442 Зал естественно-научной и технической литературы
	441 Зал иностранной литературы

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические рекомендации по проведению основных видов учебных занятий

При изучении дисциплин используются следующие основные методы и средства обучения, направленные на повышение качества подготовки аспирантов путем развития у аспирантов творческих способностей и самостоятельности:

- Контекстное обучение – мотивация аспирантов к усвоению знаний путем выявления связей между конкретными знаниями и его применением.
- Проблемное обучение – стимулирование аспирантов к самостоятельному приобретению знаний, необходимых для решения конкретной проблемы.
- Обучение на основе опыта – активизация познавательной деятельности аспиранта за счет ассоциации и собственного опыта с предметом изучения.
- Индивидуальное обучение – выстраивание аспирантами собственной образовательной траектории на основе формирования индивидуальной программы с учетом интересов аспирантов.
- Междисциплинарное обучение – использование знаний из разных областей, их группировка и концентрация в контексте решаемой задачи.

Целью практических занятий является:

- закрепление теоретического материала, рассмотренного аспирантами самостоятельно;
- проверка уровня понимания аспирантами вопросов, рассмотренных самостоятельно по учебной литературе, степени и качества усвоения материала аспирантами;
- восполнение пробелов в пройденной теоретической части курса и оказание помощи в его усвоении.

В начале очередного занятия необходимо сформулировать цель, поставить задачи. Аспиранты выполняют задания, а преподаватель контролирует ход их выполнения путем устного опроса, проверки тестов, проверки практических заданий.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы аспирантов

Целью самостоятельной работы аспирантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых нестандартных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

Методические рекомендации призваны помочь аспирантам организовать самостоятельную работу при изучении курса: с материалами практических и семинарских занятий, литературы по общим и специальным вопросам.

Задачами самостоятельной работы являются:

- систематизация и закрепление полученных теоретических знаний и практических умений;
- углубление и расширение теоретических знаний;
- формирование умений использовать нормативную, правовую, справочную документацию и специальную литературу;
- развитие познавательных способностей и активности: творческой инициативы, самостоятельности, ответственности и организованности;
- формирование самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- развитие исследовательских умений;
- использование материала, собранного и полученного в ходе самостоятельных занятий на семинарах, на практических и лабораторных занятиях, для эффективной подготовки к итоговым зачетам и экзаменам.

Аудиторная самостоятельная работа по дисциплине выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.

Внеаудиторная самостоятельная работа выполняется аспирантом по заданию преподавателя, но без его непосредственного участия.

Основными видами самостоятельной работы аспиранта без участия преподавателя являются:

- формирование и усвоение содержания конспекта лекций на базе рекомендованной лектором учебной литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.);
- подготовка к семинарам, их оформление;
- составление аннотированного списка статей из соответствующих журналов по темам занятий;
- выполнение домашних заданий в виде решения отдельных задач, проведения типовых расчетов и индивидуальных работ по отдельным разделам содержания дисциплин и т.д.

Самостоятельная работа аспирантов осуществляется в следующих формах:

- подготовка к семинарским занятиям,
- изучение дополнительной литературы и подготовка ответов на вопросы для самостоятельного изучения,
- подготовка к тестированию.

1) Подготовка к практическим занятиям.

При подготовке к практическим занятиям аспирантам необходимо ориентироваться на вопросы, вынесенные на обсуждение. На практических занятиях проводятся опросы, тестирование, разбор конкретных ситуаций, с активным обсуждением вопросов, в том числе по группам, с целью эффективного усвоения материала в рамках предложенной темы, выработки умений и навыков в профессиональной деятельности, а также в области ведения переговоров, дискуссий, обмена информацией, грамотной постановки задач, формулирования проблем, обоснованных предложений по их решению и аргументированных выводов.

2) Изучение основной и дополнительной литературы при подготовке к практическим занятиям.

В целях эффективного и полноценного проведения таких мероприятий аспиранты должны тщательно подготовиться к вопросам практического занятия. Особенно поощряется и положительно оценивается, если аспирант самостоятельно организует поиск необходимой информации с использованием периодических изданий, информационных ресурсов сети ИНТЕРНЕТ и баз данных специальных программных продуктов.

Самостоятельная работа аспирантов должна опираться на сформированные навыки и умения, приобретенные во время прохождения других курсов. Составляющим компонентом его работы должно стать творчество. В связи с этим рекомендуется:

1. Обратите внимание на структуру, композицию, язык документа, время и историю его появления.
2. Определите основные идеи, принципы, тезисы, заложенные в документ.
3. Выясните, какой сюжет, часть изучаемой проблемы позволяет осветить проанализированный источник.
4. Проведите работу с незнакомыми медицинскими терминами и понятиями, для чего используйте словари медицинских терминов, энциклопедические словари, словари иностранных слов и др.

Затем необходимо ознакомиться с библиографией темы и вопроса, выбрать доступные Вам издания из списка основной литературы, специальной литературы, рекомендованной к лекциям и практическим занятиям. Рекомендованные списки могут быть дополнены.

Используйте справочную литературу. Поиск можно продолжить, изучив примечания и сноски в уже имеющихся у Вас в руках монографиях, статьях.

Работая с литературой по теме практики, делайте выписки из текста, содержащего характеристику или комментариев уже знакомого Вам источника. После чего вернитесь к тексту документа (желательно полному, без купюр) и проведите его анализ уже в контексте изученной исследовательской литературы.

Методические рекомендации по проведению тестирования

Целью тестовых заданий является контроль и самоконтроль знаний по предмету. Кроме того, тесты ориентированы и на закрепление изученного материала. Тестовые задания составляются таким образом, чтобы проверить знания по разным разделам дисциплины, а также стимулировать познавательные способности аспирантов.

Выполнение тестовых заданий увеличивает быстроту усвоения материала, развивает четкость и ясность мышления, внимательность.

Методические рекомендации по подготовке презентаций

Создание материалов-презентаций — это вид самостоятельной работы аспирантов по созданию наглядных информационных пособий, выполненных с помощью мультимедийной компьютерной программы PowerPoint или иной. Этот вид работы требует координации навыков по сбору, систематизации, переработке информации, оформления ее в виде подборки материалов, кратко отражающих основные вопросы изучаемой темы, в электронном виде.

Создание материалов-презентаций расширяет методы и средства обработки и представления информации, формирует навыки публичного представления результатов научных исследований. Презентации готовятся аспирантом в виде слайдов с использованием программы Microsoft PowerPoint или иной.

Роль аспиранта:

- изучить материалы темы, выделяя главное и второстепенное;
- установить логическую связь между элементами темы;

- представить характеристику элементов в краткой форме;
- выбрать опорные сигналы для акцентирования главной информации и отобразить в структуре работы;
- оформить работу и предоставить к установленному сроку.

Не рекомендуется:

- перегружать слайд текстовой информацией;
- использовать блоки сплошного текста;
- в нумерованных и маркированных списках использовать уровень вложения глубже двух;
- использовать переносы слов;
- использовать наклонное и вертикальное расположение подписей и текстовых блоков;
- текст слайда не должен повторять текст, который произносится вслух (зрители прочитают его быстрее, чем расскажет аспирант, и потеряют интерес к его словам).

Методические рекомендации по проведению тестового контроля

Целью тестовых заданий является контроль и самоконтроль знаний по предмету. Кроме того, тесты ориентированы и на закрепление изученного материала. Тестовые задания составляются таким образом, чтобы проверить знания по разным разделам дисциплины, а также стимулировать познавательные способности аспирантов. При решении тестовых заданий выпишите правильные ответы через их буквенное обозначение. Некоторые задания предполагают творческий подход и эрудицию.

Методические рекомендации по подготовке к зачету

Для успешной сдачи зачета аспиранту необходимо выполнить несколько требований:

- Регулярно посещать аудиторские занятия по дисциплине; пропуск занятий не допускается без уважительной причины;
- В случае пропуска занятия аспирант должен быть готов ответить на зачете на вопросы преподавателя, взятые из пропущенной темы;
- Готовясь к очередному занятию по дисциплине, аспирант должен прочитать соответствующие разделы в учебниках, учебных пособиях, монографиях и пр., рекомендованных преподавателем в программе дисциплины и быть готовым продемонстрировать свои знания на паре; каждое участие аспиранта в обсуждении материала на практических занятиях отмечается преподавателем и учитывается при ответе на зачете;
- В случае, если аспирант не освоил необходимый материал или что-то не понял, он должен подойти к преподавателю в часы консультаций и прояснить материал.