

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.03.05.02 АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Физические методы исследования

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

04.03.01.32 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2022

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Основной задачей высших учебных заведений является подготовка специалиста с высоким уровнем профессиональной компетентности и разностороннего личностного развития, способного к непрерывному самосовершенствованию, постоянному пополнению и расширению своих знаний и умений.

Разработка новых материалов требует сопровождения современными методами анализа вещества. При этом желательно получение полной информации с минимальной затратой времени и усилий. С этой целью может быть предложено, использовать совокупность физических и физико-химических методов исследования вещества. Обоснование выбора того или иного метода должно базироваться на ясном понимании его возможностей, достоинств и недостатков. Кроме того, выбор метода во многом определяется теми целями и задачами, которые стоят перед исследователем.

Целью изучения дисциплины «Физические методы исследования» является: формирование студентами знаний о сути различных физических методов исследования вещества и их использование для изучения строения химических соединений, их реакционной способности, природы химических взаимодействий и превращений.

В сфере познавательной деятельности данная дисциплина имеет своей целью приобретение высокой востребованности выпускника на рынке труда. В области воспитания личности преследуется цель развития научной и профессиональной этики, творческих способностей, коммуникативности, настойчивости в достижении цели.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Основные задачи изучения дисциплины «Физические методы исследования» заключаются в:

- формировании представлений о роли физических методов исследования в химии;
- изучении теоретических основ различных физических методов;
- углубленном изучении применения современных физических методов исследования в научных и практических целях.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	
ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели	

при решении задач химической направленности	
ОПК-5: Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	
ОПК-5.2: Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности	
УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	
УК-1.1: Осуществляет поиск, анализ информации для решения поставленной задачи	

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	
занятия лекционного типа	1 (36)	
практические занятия	1 (36)	
Самостоятельная работа обучающихся:	2 (72)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. 1. Методы определения дипольных моментов молекул									
	1. Общие представления о природе дипольного момента. Методы определения дипольных моментов основаны на нахождении ориентационного эффекта полярных молекул в приложенном электрическом поле. Методы, основанные на микроволновой спектроскопии и молекулярных пучков. Расчетный аппарат метода дипольных моментов.	8							
	2. Расчеты дипольных моментов по данным для первого и второго методов Дебая и с использованием векторной схемы в рамках концепции групповых моментов			2					
2. 2. Спектроскопические методы анализа									
	1. Масс - спектроскопия. Ионная масс-спектрометрия. Описание прибора. Чувствительность и разрешение. Калибровка и количественный анализ. Интерпретация масс-спектров. Влияние изотопов. SIMS-изображения.	4							

<p>2. Колебательная спектроскопия. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Анализ нормальных колебаний молекулы по экспериментальным данным. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекулы. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Определение силовых полей молекулы и проблема их неоднозначности. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР, преимущества лазерных источников возбуждения.</p>	6							
<p>3. Электронная спектроскопия для химического анализа (ЭСХА). Специфика взаимодействия ионизирующего излучения с веществом. Основы метода ЭСХА. Возможности метода, достоинства и недостатки. Чувствительность и разрешение.</p>	6							
<p>4. Интерпретация результатов масс-спектрометрии</p>			5					
<p>5. Классическое рассмотрение колебаний простых многоатомных молекул. Введение естественных координат, учет симметрии. Использование концепции групповых частот в структурном анализе</p>			7					
<p>6. Идентификация электронного состояния определяемого элемента</p>			5					
3. 3. Резонансные методы исследования								

<p>1. Ядерный магнитный резонанс. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров. Характер образцов.</p>	6							
--	---	--	--	--	--	--	--	--

2. Электронный парамагнитный резонанс. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условия ЭПР. g-Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Использование спиновых меток. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности	2							
3. Метод ядерного квадрупольного резонанса. Принцип действия ядерного квадрупольного резонанса. Основы метода. Возможности метода, достоинства и недостатки. Чувствительность и разрешение.	2							
4. Метод ядерного гамма-резонанса. Основы метода ЯГР. Возможности метода, достоинства и недостатки. Чувствительность и разрешение. Изомерные сдвиги.	2							
5. Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР. Динамический ЯМР, изучение обменных и других быстропротекающих процессов			7					
6. Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций			4					
7. Метод ядерного квадрупольного резонанса			3					
8. Метод ядерного гамма-резонанса			3					

9. К самостоятельной работе студентов относится проработка теоретического материала, решение домашних задач, подготовка к сдаче зачета							72	
10. К сдаче зачета допускаются студенты успешно решившие и защитившие домашние задачи. Критерии оценки: оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если в ответе верно изложено не менее 60 % материала и не допущено существенных неточностей; оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части (более 40 %) теоретического материала и допускает существенные ошибки.								
Всего	36		36				72	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU. Полнотекстовая коллекция «Российские академические журналы on-line» (издательство «Наука») включает 139 журналов. Заключено лицензионное соглашение (до ноября 2021 г.) об использовании ресурсов со свободным доступом с компьютеров университетской сети. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/>.
2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. – Режим доступа: <http://www.nature.com> .
3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. – Режим доступа: <http://search.ebscohost.com>
4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг) . – Режим доступа: <http://www.journals.cambridge.org>
5. Royal Society of Chemistry. – Режим доступа: <http://www.rsc.org>
6. Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier. В комплект подписки Freedom Collection издательства Elsevier входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины, размещенные на платформе ScienceDirect, (23 предметные коллекции), охват более 1900 названий журналов. Архив 2010-2014 гг. . – Режим доступа: <http://www.sciencedirect.com>
7. Электронная химическая энциклопедия – он-лайн. . – Режим доступа: <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/>.
8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений. – Режим доступа: <http://chemstat.com.ru/>
- 9.
10. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.

11. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет.
-Режима доступа: <http://znanium.com/>

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

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

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.