

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Кафедра физической и органической химии химического факультета

Образовательная программа

04.03.01 - "Химия"

Профиль подготовки

Неорганическая химия и химия координационных соединений,

Аналитическая химия, Фармацевтическая химия

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: базовая

Махачкала, 2017 г.

Рабочая программа дисциплины “Физические методы исследования” составлена в 2017 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 - Химия (уровень – бакалавриата) от «12» марта 2015 г: № 210.



Разработчики: кафедра физической и органической химии, Шабанов О.М., д.х.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена: на заседании кафедры физической и органической химии от «24» января 2017 г., протокол № 5.

Зав.кафедрой  Абдулагатов И. М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от «17» февраля 2017 г., протокол № 6.

Председатель  Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «01»  2017 г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Физические методы исследования” входит в вариативную часть образовательной программы бакалавриата по направлению 04.03.01 - “Химия”.

Дисциплина реализуется на факультете химическом кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с ознакомлением студентов с современными физическими методами исследования, наиболее широко применяемых в решении теоретических и прикладных вопросов химии. Студенты знакомятся с физическими основами методов, возможностями и областями их приложения, получают определенные практические навыки их применения, решают не сложные теоретические и практические задачи.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: общекультурных – ОК-6, 7, общепрофессиональных – ОПК- 3.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 3 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семес тр	Учебные занятия						СРС, в том числе экза мен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференциро ванный зачет, экзамен
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
Лекц ии		Лаборатор ные занятия	Практич еские занятия	КСР	консульт ации			
7 сем.	108	32	30	-	-	-	46	зачет

1. Цели освоения дисциплины

Преподавание курса “Физические методы исследования” ставит цели:

- ознакомить студентов с наиболее широко применяемыми современными физическими методами исследования, физическими основами и областями применения, возможностями современных физических методов;

- подготовить специалистов-химиков, владеющих современными инструментальными методами исследования, контроля и управления процессами;

- приобретения навыков и умений применения данных методов для решения несложных теоретических и прикладных задач химии.

2. Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата

Дисциплина “Физические методы исследования” входит в вариативную часть образовательной программы бакалавриата по направлению 04.03.01 - “Химия”.

Курс необходим как для непосредственной работы по специальности, так и для понимания основных направлений химической науки и ее развития. В методическом плане курс “Физические методы исследования” активизирует знания студентов не только по химии, но и по физике, математике. Его изучают после прохождения таких предметов как “Органическая химия”, “Физическая химия”.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ОК-6	Обладать способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия.	Знать: принципы функционирования профессионального коллектива, понимать роль корпоративных норм и стандартов. Уметь: работать в коллективе, эффективно выполнять задачи профессиональной деятельности. Владеть: приемами взаимодействия с сотрудниками, выполняющими различные профессиональные задачи и обязанности.
ОК-7	Обладать способностью к самоорганизации и самообразованию.	Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности. Уметь: планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия

		<p>решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности.</p> <p>Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности.</p> <p>Владеть: приемами саморегуляции эмоциональных и функциональных состояний при выполнении профессиональной деятельности.</p> <p>Владеть: технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности.</p>
ОПК-3	Способность применять знания в области естественнонаучных дисциплин (математики, физики, биологии) при решении задач профессиональной деятельности	<p>Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения</p> <p>Знать: основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин</p> <p>Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин</p> <p>Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин</p>

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 академических часа.

4.2. Структура дисциплины

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Семе стр	Нед еля сем ест ра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Само стоят ельна я работ а	Формы текущего контроля успеваемости (<i>по неделям семест ра</i>) Форма промежуточной аттестации (<i>по семест рам</i>)
				Ле кц ии	Прак тиче ские зая ния	Ла б. за ня ти я	Кон тро ль сам ост. раб.		
Модуль 1. Общая характеристика ФМИ. Методы: масс-спектр. и дипольных моментов									
1	Общая характеристика ФМИ	7		2		-		4	устный опрос, тестирование
2	Масс-спектрометрия	7		4		4		6	устный опрос, тестирование
3	Метод дипольных моментов	7		4		6		6	устный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 1:</i>	36		10		10		16	коллоквиум
Модуль 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия.									
1	1. Основы спектральных методов исследования	7		2		-		6	устный опрос, тестирование
2	2. Колебательная спектроскопия. Электронные спектры поглощения.	7		6		10		4	устный опрос, тестирование
3	3. Вращательная спектроскопия	7		2		-		6	устный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 2:</i>	36		10		10		16	коллоквиум
Модуль 3. Магнетохим. и электрооптич. методы. Резонансные методы									
1	Магнетохимические и электрооптические методы исследования	7		6				8	устный опрос, тестирование
2	Резонансные методы	7		6				6	устный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 3:</i>	36		12		10		14	коллоквиум
	ИТОГО:	108		32		30		46	зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

Модуль 1. Общая характеристика ФМИ.

Методы: масс-спектрометрия и дипольные моменты

Тема 1. Общая характеристика ФМИ. Чувствительность и разрешающая способность. Характеристическое время метода. Прямая и обратная задача.

Тема 2. Физические основы метода. Масс-спектрометрия. Методы ионизации. Потенциалы появления ионов. Типы ионов в масс-спектрометрии. Принципиальная схема масс-спектрометра. Основное уравнение масс-спектрометрии. Разрешающая сила прибора. Типы масс-спектрометров. Применение масс-спектрометрии в химии: идентификация веществ, определение молекулярных масс, структурные и термодинамические исследования. Определение потенциалов ионизации и энергий разрыва связей.

Тема 3. Диэлектрики в электрическом поле. Дипольный момент молекулы. Природа дипольного момента. Поляризация молекул. Уравнения Клаузиуса-Моссотти и Дебая. Экспериментальные методы определения дипольных моментов. Расчетный аппарат метода дипольных моментов. Связевые и групповые моменты. Использование данных метода дипольных моментов в химии.

Модуль 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия.

Тема 1. Теоретические основы спектроскопических методов исследования. Взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Природа электромагн. излучения. Основные характеристики излучения. Переходы в атомах и молекулах. Важнейшие характеристики спектральных линий.

Тема 2. Колебательная спектроскопия. Колебания двух- и многоатомных молекул. Частота и формы нормальных колебаний. Силовые постоянные. Учет симметрии. Уровни энергии и их классификация. Правила отбора. Колебания многоатомных молекул. Анализ нормальных колебаний. Концепция групповых частот. Особенности поглощения основных классов органических соединений. КР-спектроскопия. Сопоставление данных ИК – и КР-спектров. Электронные состояния многоатомных молекул и их характеристика. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивность полос. Правила отбора. Особенности поглощения основных классов органических соединений в УФ- и видимой областях. Применение электронных спектров в химии. Техника и методика измерения в УФ и видимой областях.

Тема 3. Вращательная спектроскопия. Вращательные спектры поглощения молекул. Условия получения вращательных спектров в далекой ИК- и микроволновой областях. Область частот. Правила отбора. Применение вращательных спектров в химии.

Раздел 3. Магнетохимические и резонансные методы исследования

Тема 1. Магнетохимические и электрооптические методы исследования.

Поведение вещества во внешнем магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость. Природа явлений диа-, пара-, ферро- и ферримагнетизма. Магнитные свойства неорганических и координационных соединений.

Тема 2. Физические основы метода ЯМР. Спины и магнитные моменты ядер. Ядерный парамагнетизм. Условия ядерного резонанса. Основное уравнение ЯМР. Применение ЯМР в химии. Структурный анализ. Изучение быстропротекающих процессов. Блок-схема ЯМР-спектрометра. Условия снятия спектров. Особенности ЯМР-спектров на других ядрах. Физические основы метода. Условия ЭПР. G-фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление. Константа СТС. Применение ЭПР в химии.

Тематика лабораторных работ

Названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Результаты лабораторной работы
Лабораторная работа №1. Изучение масс-спектра заданного органического соединения		
Лабораторная работа №2. Определение типа изомера заданного органического соединения методом дипольных моментов		
Раздел 1. Общая характеристика ФМИ. Методы масс-спектрометрии и дипольных моментов Тема 3. Метод дипольных моментов.	Ознакомиться со 2-м методом Дебая определения дипольных моментов и векторной аддитивной схемой расчета дипольного момента. Определить на основе экспериментальных и расчетных данных тип изомера.	Определение экспериментального дипольного момента заданного соединения. Расчет моментов возможных изомеров. Установление типа изомера
Лабораторная работа №3. Изучение электронных спектров поглощения комплексов по сравнению с комплексами лигандов		
Раздел 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия. Тема 5. Колебательная спектроскопия. Электронные спектры поглощения	Освоить методику снятия и обработки электронных спектров поглощения. Снять УФ-спектр лиганда и его комплекса. Анализ полученных спектров.	Получить электронные спектры поглощения комплексов Ni(II) и Co(II) с органическим лигандом азольного ряда.

Лабораторная работа №4. Изучение ИК-спектров органических соединений		
<p>Раздел 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия.</p> <p>Тема 5. Колебательная спектроскопия. Электронные спектры поглощения</p>	<p>Ознакомиться с аппаратурой и методикой снятия ИК-спектров. Освоить методику структурно-группового анализа. Определить структуру соединений.</p>	<p>Получить ИК-спектры заданных органических соединений в пасте с вазелиновым маслом и таблетках с КВг.</p>

5. Образовательные технологии

В ходе освоения дисциплины предусматривается применение следующих активных методов обучения:

Выполнение лабораторных работ с элементами исследования.

Отчетные занятия по разделам «Методы: масс-спектрометрия и дипольные моменты», «Методы оптической спектроскопии», «Магнетохимические и электрооптические методы. Резонансные методы».

Выполнение студентами индивидуальной исследовательской работы по анализу реального объекта с поиском и выбором метода и схемы определения на практических занятиях.

Разбор конкретных ситуаций.

Круглый стол.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 6.2, и 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе.	См. разделы 6.2 и 7.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашнего задания	См. разделы 6.2 и

			7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 6.2 и 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Подготовка к зачету.	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

6.2 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Вопросы для самостоятельного изучения внесены по конкретным темам в методические указания для лабораторных занятий.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Компетенция	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ОК-6	Знать: принципы функционирования профессионального коллектива, понимать роль корпоративных норм и стандартов Уметь: работать в коллективе, эффективно выполнять задачи профессиональной деятельности	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум

	Владеть: приемами взаимодействия с сотрудниками, выполняющими различные профессиональные задачи и обязанности	Круглый стол, деловая игра
ОК-7	Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности; планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности, технологиями организации процесса самообразования; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности.	Круглый стол, деловая игра
ОПК-3	Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения; основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Круглый стол, деловая игра, мини-конференция

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ОК-6 «Способность работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия»

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Пороговый	Владеть: приемами взаимодействия с сотрудниками, выполняющими различные профессиональные задачи и обязанности	Демонстрирует частичные владения без грубых ошибок	Владеет базовыми приемами	Демонстрирует владения на высоком уровне
	Уметь: работать в коллективе, эффективно выполнять задачи профессиональной деятельности	Демонстрирует частичные умения без грубых ошибок	Умеет применять знания в базовом (стандартном) объеме	Демонстрирует высокий уровень умений
	Знать: принципы функционирования профессионального коллектива, понимать роль корпоративных норм и стандартов	Демонстрирует частичные знания без грубых ошибок	Знает достаточно в базовом объеме	Демонстрирует высокий уровень знаний

ОК-7 «Способность к самоорганизации и самообразованию»

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Пороговый	Владеть: приемами саморегуляции эмоциональных и функциональных состояний при выполнении профессиональн	Владеет отдельными приемами саморегуляции, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывая конкретные условия и свои	Демонстрирует возможность и обоснованность реализации приемов саморегуляции при выполнении деятельности в конкретных	Демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности.

	ой деятельности	возможности при принятии решений.	заданных условиях.	
	Владеть: технологиями организации процесса самообразования ; приемами целеполагания во временной перспективе, способами планирования, организации, самоконтроля и самооценки деятельности.	Владеет отдельными приемами организации собственной познавательной деятельности, осознавая перспективы профессионального развития, но не давая аргументированное обоснование адекватности отобранной для усвоения информации целям самообразования.	Владеет системой приемов организации процесса самообразования только в определенной сфере деятельности.	Демонстрирует возможность переноса технологии организации процесса самообразования , сформированной в одной сфере деятельности, на другие сферы, полностью обосновывая выбор используемых методов и приемов.
	Уметь: планировать цели и устанавливать приоритеты при выборе способов принятия решений с учетом условий, средств, личностных возможностей и временной перспективы достижения; осуществления деятельности.	При планировании и установлении приоритетов целей профессиональной деятельности не полностью учитывает внешние и внутренние условия их достижения.	Планируя цели деятельности с учетом условий их достижения, дает не полностью аргументированное обоснование соответствия выбранных способов выполнения деятельности намеченным целям.	Готов и умеет формировать приоритетные цели деятельности, давая полную аргументацию принимаемым решениям при выборе способов выполнения деятельности
	Уметь: самостоятельно строить процесс овладения информацией, отобранной и структурированной для выполнения профессиональной деятельности.	Владеет отдельными методами и приемами отбора необходимой для усвоения информации, давая не полностью аргументированное обоснование ее соответствия целям самообразования.	Владеет системой отбора содержания обучения в соответствии с намеченными целями самообразования, но при выборе методов и приемов не полностью учитывает условия и личностные возможности овладения этим содержанием.	Умеет строить процесс самообразования с учетом внешних и внутренних условий реализации.

	Знать: содержание процессов самоорганизации и самообразования, их особенностей и технологий реализации, исходя из целей совершенствования профессиональной деятельности.	Демонстрирует частичное знание содержания процессов самоорганизации и самообразования, некоторых особенностей и технологий реализации, но не может обосновать их соответствие запланированным целям профессионального совершенствования.	Демонстрирует знание содержания и особенностей процессов самоорганизации и самообразования, но дает неполное обоснование соответствия выбранных технологий реализации процессов целям профессионального роста.	Владеет полной системой знаний о содержании, особенностях процессов самоорганизации и самообразования, аргументированно обосновывает принятые решения при выборе технологий их реализации с учетом целей профессионального и личного развития.
--	--	--	--	--

ОПК-3 “Способность применять знания в области естественнонаучных дисциплин (математики, физики, биологии) при решении задач профессиональной деятельности”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Пороговый	Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Владеет навыками воспроизведения освоенного учебного материала, в целом владеет основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Владеет навыками самостоятельного изучения отдельных разделов учебной литературы, владеет основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Владеет навыками критического анализа учебной информации, уровень владения терминологией и понятийным аппаратом позволяет формулировать выводы и участвовать в дискуссии по учебным вопросам базовых математических и

				естественнонаучных дисциплин
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин	Умеет решать типовые задачи из базовых курсов естественнонаучных дисциплин	Умеет решать комбинированные задачи из базовых курсов естественнонаучных дисциплин	Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов естественнонаучных дисциплин
	Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения	Имеет представление о способах использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения, но допускает неточности в формулировках	Имеет представление о способах использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения	Имеет четкое, целостное представление о способах использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения
	Знать: основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Имеет представление о содержании отдельных разделов смежных с химией естественнонаучных дисциплин, но допускает неточности в формулировках	Имеет представление о содержании основных разделов смежных с химией естественнонаучных дисциплин, знает терминологию, основные законы и понимает сущность общих закономерностей этих областей знания	Имеет четкое, целостное представление об общих закономерностях смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в области химии и материаловедения

7.3. Типовые контрольные задания.

Примерная тематика рефератов

1. Электронные эффекты в органической химии и их исследование методом электронной спектроскопии.
2. Применение электронных спектров поглощения в координационной химии.
3. Применение микроволновой спектроскопии для определения молекулярных постоянных.
4. Колебательная спектроскопия сложных молекул и структурно-групповой анализ.
5. Применение масс-спектроскопии для анализа природных объектов.
6. Метод дипольных моментов в структурном анализе органических соединений.
7. ЯМР-спектры первого порядка в структурном анализе в органических соединений.
8. Применение ЯМР-спектроскопии для исследования кинетики органических реакций.
9. ФМИ в изучении молекулярных комплексов.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (зачет и экзамен).

Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- активность на занятиях и выполнение домашних заданий (10 баллов),
- допуск, выполнение и сдача лабораторных работ (30 баллов),
- тестирования (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (20 баллов).

Промежуточный контроль (коллоквиум) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Высокомолекулярные соединения”, изучавшимся в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

Вопросы по текущему контролю

1. Общая характеристика ФМИ. Значение ФМИ в химии.
2. Классификация ФМИ. Чувствительность и разрешающая способность.
3. Прямая и обратная задача.
4. Физические основы метода масс-спектрометрии. Принципиальная схема масс-спектрометра.
5. Методы ионизации.
6. Типы ионов, образуемых в камере ионизации.

7. Методы регистрации масс-спектров.
8. Разделение ионов по массам. Основное уравнение масс-спектрометрии.
9. Разрешающая сила прибора. Приборы низкого и высокого разрешения.
10. Особенности фрагментации молекул органических соединений.
11. Применение масс-спектрометрии в химии.
12. Природа электрического дипольного момента. Единицы измерения дипольных моментов.
13. Поляризация молекул. Уравнение Клаузиуса-Моссоти.
14. Ориентационная поляризация. Ее связь с дипольным моментом.
15. Рефракция. Уравнение Лорентц-Лоренца. Расчет рефракции.
16. Метод определения дипольных моментов. Уравнение Дебая, его анализ.
17. Первый метод Дебая.
18. Второй метод Дебая.
19. Расчетный аппарат метода дипольных моментов. Векторная схема расчета.
20. Применение данных дипольных моментов в химии.
21. Общая характеристика спектральных методов исследования. Спектральные величины: энергия колебаний, частота, длина волны, волновое число.
22. Переходы в атомах и молекулах.
23. Основной закон светопоглощения. Закон Ламберта-Бугера-Бера.
24. Вращательные спектры в далекой ИК и микроволновой области.
25. Применение данных вращательных спектров для определения молекулярных постоянных.
26. Колебательная спектроскопия. Колебания двухатомных молекул. Силовая постоянная связи.
27. Колебания многоатомных молекул. Валентные и деформационные колебания.
28. Интерпретация ИК-спектров сложных органических соединений. Особенности поглощения основных классов.
29. Структурно-групповой анализ. Характеристические полосы поглощения.
30. Применение колебательной спектроскопии в химии.
31. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
32. Электронные спектры поглощения. Физические основы электронных спектров поглощения.
33. Классификация и отнесения электронных переходов.
34. Поглощение основных классов органических соединений в УФ и видимой областях.
35. Электронные спектры и эффекты сопряжения, хромофоры и ауксохромы.
36. Применение электронных спектров в количественном и качественном анализе.
37. Применение электронных спектров в координационной химии.
38. Поведение вещества во внешнем магнитном поле. Магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость. Магнитная индукция.

39. Природа диа-, пара-, ферро- и ферримагнетизма. Магнитные свойства неорганических и координационных соединений.
40. Методы определения магнитной восприимчивости. Методы Гауи и Фарадея.
41. Физические основы метода ЯМР. Спины и магнитные моменты ядер.
42. Условия ЯМР. Основные уравнения ЯМР.
43. Химсдвиг. Шкала химсдвигов. Эталоны.
44. Спин-спиновая связь. Константа спин-спинового взаимодействия.
45. Анализ ЯМР-спектров первого порядка.
46. Особенности ЯМР-спектров на ядрах C^{13} , F^{19} , P^{31} и др.
47. Применение данных ЯМР в структурном анализе.
48. Другие области применения ЯМР в химии.
49. Аппаратура и техника снятия ЯМР-спектров.
50. Спектроскопия ЭПР. Условие ЭПР.
51. g-фактор и его значение.
52. Сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР.
53. Применение ЭПР в химии.
54. Комбинированное применение ФМИ в структурных исследованиях.

Контрольные вопросы к итоговому контролю

Билеты к итоговому контролю формируются из вопросов к текущему контролю и задачи. В каждый билет входят 3 вопроса – 2 по теории и 1 задача.

Примерные тестовые задания

1. К какому типу переходов относятся полосы поглощения углеводорода $(CH_3)_2C=CH-CO-CH=C(CH_3)_2$ при $\lambda_{max} = 380$ нм и 260 нм, если известно, что $D_{380} = 0,80$ ($l=1$ см, $C=0,01$ моль/л) и $D_{260}=0,24$ ($l=0,01$ см и $C=0,001$ моль/л)?
 а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$; б) $\pi \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \sigma^*$; в) $\pi \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$; г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$
2. Какие колебания называются валентными? При которых:
 а) меняются углы между связями, не меняются длины связей;
 б) меняются длины связей, не меняются углы между ними;
 в) обе параметры меняются;
 г) обе параметры не меняются.
3. Чему равна рефракция молекулы C_2H_5OH , рассчитанная по рефракциям связей:
 а) 13,55; б) 12,73; в) 10,85; г) 11,80.
4. Какому методу ионизации Вы дали бы предпочтение при ионизации предельных углеводородов с относительно малой молекулярной массой:
 а) химической; б) фотоионизации; в) электронному удару;
 г) полевой.
 Ответ обоснуйте.
5. Ядра всех атомов какого из приведенного ниже рядов активны (дают сигнал) в ЯМР спектроскопии:

а) $^{12}\text{C } ^1\text{H } ^{16}\text{O}$; б) $^{14}\text{N } ^{32}\text{S } ^1\text{H}$; в) $^{19}\text{F } ^{14}\text{N } ^{16}\text{O}$; г) $^1\text{H } ^{14}\text{N } ^{19}\text{F}$.

Ответ обоснуйте.

6. Как по сигналу ЭПР определить число неспаренных электронов в исследуемом образце:

- а) по положению сигнала; б) по площади сигнала;
в) по расщеплению сигнала.

Дайте пояснение.

7. Определите разрешающую силу масс-спектрометра для разделения ионов с массами: 200 и 201, 2000 и 2001.

- а) 100 и 1500; б) 200 и 2000; в) 150 и 1500; г) 180 и 1700.

Дайте понятие разрешающей силе прибора.

8. Укажите все возможные электронные переходы в следующих молекулах:

а) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$;

в) CH_3COOH

а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$

а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \sigma$

б) $\pi \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$

б) $\pi \rightarrow \pi^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$

в) $\pi \rightarrow \pi^*$; $\sigma \rightarrow \sigma^*$

в) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$

г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \sigma^*$

г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$

Дайте их характеристику.

9. Молекула H_2O обладает колебательными степенями свободы: 3, 2, 4, 5.

Ответ мотивируйте. Покажите схематически колебания, соответствующие этим степеням свободы.

10. Для двузамещенного бензола $\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_4$ величина экспериментального дипольного момента равна 3,36 Д. Определите тип изомера:

- а) орто; б) мета; в) пара.

Ответ подтвердите расчетом.

11. Укажите структуру соединения, $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}_3$, которая соответствует данным ЯМР-спектра: синглет ($\delta = 2,20$ м.д. и $4,02$ м.д.) с соотношением площадей сигналов 3:2.

а) $\text{CHCl}_2\text{-CHCl-CH}_3$;

б) $\text{CCl}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$;

в) $\text{CH}_2\text{Cl-CCl}_2\text{-CH}_3$;

г) $\text{CH}_2\text{Cl-CHCl-CH}_2\text{Cl}$.

Ответ поясните.

12. Какие переходы регистрируют микроволновые спектры:

а) колебательные;

б) электронные;

в) Вращательные;

г) колебательно-вращательные.

Дайте краткую характеристику этих переходов.

13. Сделайте отнесение полосы поглощения углеводорода состава C_8H_{14} с

$\lambda_{\text{max}} = 243\text{нм}$ и $\lg \varepsilon = 4,4$.

а) $\sigma \rightarrow \sigma$; б) $\pi \rightarrow \pi^*$; в) $n \rightarrow \pi^*$; в) $n \rightarrow \sigma^*$;

Ответ мотивируйте.

14. Что такое деформационные колебания? Колебания при которых:

а) Меняется угол между связями, но не меняется длина связей;

б) Меняется длина связей, но не меняется угол между ними;

в) Меняются оба параметра;

г) Не меняются оба параметра.

15. Какой вид поляризации молекулы связана с ее дипольным моментом:
а) атомная; б) ориентационная; в) электронная.

Приведите формулу этой поляризации и дайте ее анализ.

16. Что необходимо сделать, чтобы увеличить интенсивность пика молекулярного иона в масс-спектре при ионизации электронным ударом:

- а) увеличить энергию ионизирующих электронов;
- б) уменьшить энергию ионизирующих электронов;
- в) Изменить ускоряющий потенциал.

17. На каком явлении основан метод ЯМР?

На взаимодействии:

- а) электронов с магнитным полем;
- б) ядер с магнитным полем;
- в) ядер с электрическим полем;
- г) электронов с электрическим полем.

18. Укажите ряд, все молекулы которого можно исследовать методом микроволновой электроскопии:

- а) H_2 , NH_3 , O_2 ; б) CH_4 , H_2O , C_6H_6 ; в) N_2 , O_2 , CH_2CH_3 ;
- г) H_2O , NH_3 , $CH_3CH_2CH_3$.

19. Объясните как меняется положение λ_{max} полосы поглощения, соответствующая $\pi \rightarrow \pi^*$ переходу при переходе от этилена ($H_2C=CH_2$) к дивинилу ($H_2C=CH-CH=CH_2$):

- а) Смещается в сторону меньших длин волн;
- б) Смещается в сторону больших длин волн;
- в) Не претерпевает изменений;
- г) Усиливается лишь интенсивность полосы поглощения.

Ответ мотивируйте.

20. Какова формула вещества: $CH_3COOC_2H_5$ или C_3H_7COOH , если в ИК-спектре наряду с другими полосами имеются широкая полоса поглощения в области $3250-2700\text{ см}^{-1}$, полосы поглощения при 1725 и 900 см^{-1} :

- а) $CH_3COOC_2H_5$; б) C_3H_7COOH .

Ответ мотивируйте.

21. Что такой дипольный момент (в каких единицах он выражается):

- а) Расстояние между центрами поделенных зарядов (м);
- б) Произведение заряда на расстояние между ними (Кл/м);
- в) Произведение массы атомов на длину связи (Кг·м);
- г) Отношение произведения поделенных зарядов на квадрат расстояния между ними (Кл/м^2).

22. Что означает запись в масс-спектроскопии: 72(6), 71(4), 58(2):

- а) Отношение массы иона к его заряду;
- б) Отношение массы иона к относительной интенсивности его пика;
- в) Отношение массы иона к потенциалу ионизации.

Назовите формы регистрации масс-спектров и охарактеризуйте их.

23. Укажите структуру соединения $C_3H_3Cl_5$, которая соответствует данным ЯМР-спектра: триплет ($\delta = 4,52 \text{ м.д.}$ и дублет $\delta = 6,07 \text{ м.д.}$) с соотношением площадей сигналов 1:2.

- а) $H_3C-CCl_2-CCl_3$; б) $CClH_2C-CHCl-CCl_3$;
в) $Cl_2HC-CHCl-CHCl_2$; г) $Cl_2HC-CH_2-CCl_3$.

Ответ мотивируйте.

24. При наличии какого элемента симметрии молекула не активна в микроволновой спектроскопии:

- а) C_s ; б) C_n ; в) S_n ; г) C_{nv} .

25. Какое явление лежит в основе метода масспектрометрии:

- а) взаимодействие вещества с электромагнитным излучением;
б) поляризация вещества в электрическом поле;
в) ионизация вещества с регистрацией образовавшихся ионов.

26. Какие электронные переходы и соответствующие им полосы поглощения будут в спектрах молекулы $(CH_3CH_2)_3N$ в этанольном (а) и подкисленном соляной кислотой этанольном растворе (б):

- | | |
|--|----------------------------------|
| а) $\pi \rightarrow \pi^*$; $n \rightarrow \pi^*$ | б) $\sigma \rightarrow \sigma^*$ |
| $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $n \rightarrow \pi^*$ | $\pi \rightarrow \pi^*$ |
| $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $n \rightarrow \sigma^*$ | $n \rightarrow \pi^*$ |
| $\pi \rightarrow \pi^*$; $\sigma \rightarrow \sigma^*$ | $n \rightarrow \sigma^*$ |

27. В ИК-спектре раствора найдены полосы поглощения: 3450 см^{-1} , 3370 см^{-1} , 1630 см^{-1} . Какому из приведенных ниже соединению соответствуют данные спектра:

- а) $CH_3CON(CH_3)_2$; б) CH_3CONH_2 ; в) $CH_3CONHCH_3$

28. При какой точечной группе симметрии молекула не имеет собственного дипольного момента:

- а) C_s ; б) C_n ; в) C_{nv} ; г) S_n

29. Определите структуру соединения состава C_7H_8S , если в ЯМР спектре этого соединения обнаружены сигналы с $\delta=7,2$; $3,27$ и $2,30$ м.д.

- а) $C_7H_5SCH_3$; б) $C_7H_4SHCH_3$;
б) $H_2C=CH-CH=CH-S-CH=CH_2$; г) $H_3C-CH_2-C \equiv C-CH-C \equiv CH$
SH

30. Для исследования, каких соединений используется метод ЭПР:

- а) не содержащих неспаренные электроны;
б) органических веществ;
в) содержащих неспаренные электроны;
г) соединений не переходных металлов.

31. Какая энергия (в ккал/моль) соответствует электронному переходу при длине волны 292 нм :

- а) 100; б) 120; в) 110; г) 102

32. Какие колебания активны в ИК? Которые сопровождаются:

- а) изменением поляризуемости;
б) изменением дипольного момента;
в) изменением поляризуемости и дипольного момента.

Рассмотрите колебания нелинейной молекулы типа $AХ_2$

33. Дипольный момент дихлорбензола равен 2,20 Д. Определите тип изомера:

а) орто; б) мета; в) пара.

Ответ подтвердите расчетом.

34. Определите разрешающую силу масс-спектрометра для разделения ионов с массами: 43,989828 и 44,062600

а) 100; б) 400; в) 605; г) 1000.

35. Чему равна мультиплетность сигнала от протонов при C_3 в молекуле CH_3-CH_2-CHCl :

а) двум; б) четырем; в) пяти; г) трем.

36. Какое явление лежит в основе метода ЭПР:

- а) Взаимодействие спин свободных ядер с магнитным полем;
- б) Взаимодействие неспаренных электронов с магнитным полем;
- в) Взаимодействие неспаренных электронов с электрическим полем;
- г) Взаимодействие спин-свободных ядер с электрическим полем.

37. Основное и нижнее возбужденное электронное состояние некоторой молекулы (в парах) различаются на 100 ккал/моль. При какой длине волны (нм) будет наблюдаться соответствующий электронный переход:

а) 270; б) 280; в) 286; г) 295.

Ответ подтвердите.

38. Что такое волновое число (в каких единицах оно выражается):

- а) число колебаний в сек (Гц);
- б) длина волны электромагнитного излучения (нм);
- в) число волн, приходящее на 1 см пути излучения (cm^{-1}).

39. Сколько сигналов будет в ЯМР спектре этилового спирта:

а) один; б) два; в) три; г) четыре.

Ответ обоснуйте.

40. Что такое второй метод Дебая для определения дипольных моментов молекул:

- а) Метод определения дипольных моментов в парообразной фазе;
- б) Метод электрического резонанса;
- в) Метод определения дипольных моментов полярных веществ в неполярных растворителях;
- г) Микроволновой метод.

Напишите уравнения Дебая и анализируйте его.

41. Какие из приведенных ниже молекул можно исследовать методом микроволновой спектроскопии:

а) N_2 , O_2 ; б) CCl_4 , CH_4 ; в) HCl , NH_3 ; г) C_6H_6 , C_2H_6 .

42. Какие колебания активны в КР-спектроскопии? Которые сопровождаются:

- а) изменением дипольного момента молекулы;
- б) изменением поляризуемости;
- в) изменением обоих факторов;

Рассмотрите колебания спектра КР молекулы CO_2 .

43. Валентные колебания ОН группы обнаружены: во льду – 3200 см^{-1} ;

в водяном паре – 3567 и 3756 см^{-1} ; в жидкой воде – 3490 см^{-1} .

Как будет влиять повышение температуры на положение полосы поглощения жидкой воды:

- а) сдвигается в сторону низких волновых чисел;
- б) сдвигается в сторону больших волновых чисел;
- в) не претерпевает изменений.

44. Какой ответ наиболее полно охватывает критерии отнесения $\pi \rightarrow \pi^*$ или $n \rightarrow \pi^*$ полос поглощения при их одновременном присутствии с исследуемой молекуле:

- а) интенсивность и полуширина полосы поглощения;
- б) оптическая плотность и положение полосы поглощения;
- в) интенсивность, замена неполярного растворителя на полярной и подкисление раствора.

45. Вычислите дипольный момент 4,5-дихлор-1,3-бистрифторметил бензола:

- а) 1,15 Д; б) 1,40 Д; в) 2,05 Д; г) 1,80 Д.

46. Какому методу ионизации Вы дали бы предпочтение при исследовании сахаров масспектрометрическим методом:

- а) электронный удар; б) химическая;
- в) полевая; г) фотоионизация.

Ответ обоснуйте.

47. Какие молекулы не дают чисто вращательных спектров в микроволновой области:

- а) не обладающие дипольным моментом;
- б) обладающие дипольным моментом;
- в) предельных углеводов;
- г) не предельных углеводов.

48. Какие электронные переходы возможны в молекуле



- а) $\pi \rightarrow \pi^*$; $n \rightarrow \pi^*$; б) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $n \rightarrow \pi^*$; в) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $\pi \rightarrow \pi^*$ г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; $n \rightarrow \sigma^*$

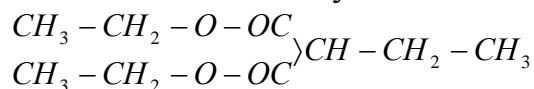
49. Для молекулы HCl $\bar{\nu} = 2890 \text{см}^{-1}$ соответствует переходу из основного в первое возбужденное колебательное состояние. Определите k (силовая постоянная) для этого колебания.

- а) $2,82 \cdot 10^5$ дин/см; б) $4,84 \cdot 10^5$ дин/см;
- в) $8,62 \cdot 10^5$ дин/см; г) $6,24 \cdot 10^5$ дин/см.

50. Что такое первый метод Дебая определения дипольных моментов молекул.

- а) метод определения дипольных моментов полярных веществ в неполярных растворителях;
- б) метод определения дипольных моментов в парообразной фазе;
- в) метод микроволновой спектроскопии;
- г) метод электрического резонанса.

51. Сколько сигналов будет в ЯМР спектре соединения:



а) два; б) три; в) пять; г) четыре.

52. В чем причина сверхтонкого расщепления сигналов ЭПР:

- а) взаимодействие электронов соседних атомов;
- б) взаимодействие свободных электронов с ядрами соседних атомов;
- в) взаимодействие свободных электронов с ядрами атомов, у которых локализованы электроны;
- г) взаимодействие спинов соседних ядер.

53. Укажите в каком пункте наиболее полно отмечены основные области применения микроволновой спектроскопии в химии:

- а) Определение: молекулярных масс; дипольных моментов; энергий связей; рефракций молекул; атомных поляризаций.
- б) Определение: валентных углов; длин связей; дипольных моментов; барьеров вращения; конформационный анализ.
- в) Определение: барьеров вращения; длин связей; потенциалов ионизации. Исследование: таутомерии молекул эффектов сопряжений.

54. Что такое молярный коэффициент погашения:

- а) силовая постоянная химической связи;
- б) величина, равная оптической плотности при $C=1$ моль/л и $l=1$ см;
- в) коэффициент пропускания;
- г) логарифм отношения интенсивностей светового потока до и после прохождения через слой вещества.

55. Почему частота (волновое число) валентного колебания простой связи меньше частоты (волнового числа) соответствующей двойной связи, которая в свою очередь меньше частоты (волнового числа) тройной:

Например: C-C ~ 1000 см⁻¹; C=C $\sim 1650 \pm 30$ см⁻¹; C \equiv C $\sim 2100 \pm 30$ см⁻¹.

- а) уменьшается силовая постоянная связи;
- б) увеличивается силовая постоянная связи;
- в) силовая постоянная не меняется.

56. В чем принципиальное отличие ИК и КР спектров:

- а) первые регистрируют колебательные переходы, вторые – только вращательные;
- б) в ИК активны колебания, при которых меняется поляризуемость молекулы, в КР – дипольный момент;
- в) в ИК активны колебания, при которых меняется дипольный момент молекулы, КР-поляризуемость;
- г) нет принципиальных различий.

57. Чему равна мультиплетность сигналов метильной и метиленовой группы в соединении CH₃-CH₂-CHCl-CCl₃:

- а) 2 и 4 ; б) 3 и 5 ; в) 4 и 3; г) 4 и 5.

58. Рассчитайте момент диполя молекулы 1-нитро-5-хлор-бис-1,3(трифторметил)-бензола.

- а) 1,25 Д; б) 0,95 Д; в) 0,55 Д; г) 1,50 Д.

59. На каком явлении основаны дифракционные методы исследования:

- а) на регистрации рассеянного излучения в ИК и микроволновой области;
- б) на рассеянии излучения или потока частиц без изменения их энергии;

- в) на взаимодействии потока частиц с внешним магнитным полем;
- г) на взаимодействии потока частиц с внешним электрическим полем.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- участие на практических занятиях - 0 баллов,
- выполнение лабораторных заданий – 30 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) основная литература:

1. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Мир, 2006. 683 с.
2. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. Бином, 2008. 398 с.
3. Баличева Т.Г. и др. Физические методы исследования неорганических веществ. М.: Академия, 2006. 443 с.
7. Юнусов К.М., Магомедова А.О. Физические методы исследования в химии. Метод дипольных моментов. Махачкала, Изд-во ДГУ, 2009. 21 с.

б) дополнительная литература:

1. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, 2. Мир. М.: 1981.
2. Кузьменко Е.Н. Гл. 11. Спектроскопические методы.//Основы аналитической химии. Кн. 2. Методы химического анализа. М.: Высш. шк., 1996. С. 199-352.
3. Калинин В.Т., Ракитин Ю.В. Введение в магнетохимию. М.: Наука. 1980.
4. Минкин В.И., Осипов О.А., Ю.А.Жданов. Дипольные моменты в органической химии. Л.: 1968.
5. Иоффе Б.Ф., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высшая школа, 1984.
6. Мальцев А.А. Практикум по молекулярной спектроскопии. Уч. пособие.
7. Бабушкин А.А., Баулин П.А., Королев Ф.А. и др. Методы спектроскопического анализа. Изд. МГУ. 1963.

8. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР. Учебн. пос. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981.
9. Свердлов О.В. Электронные спектры в органической химии. Л.: Химия, 1985.
10. Коптев Г.С., Пентин Ю.А. Расчет колебаний молекул. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1977.
11. Рюмин В.Н. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1987.
12. Зенкевич И.Г., Иоффе Б.В. Интерпретация масс-спектров органических соединений. Л.: Химия, 1986.
13. Вульфсон НС., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектроскопия органических соединений. М.: Химия, 1986.
14. Жарский И.М., Новиков Г.И. Физические методы исследования в неорганической химии. М.: Высш. Шк., 1988.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ elib.dgu.ru
2. <http://www.biblioclub.ru>
3. http://www.biblioclub.ru/116041_Primenenie_IK_spektroskopii_v_khimii_Konspekt_lektsii.htm
4. Каталог образовательных интернет-ресурсов <http://www.edu.ru/>
5. Химический каталог: Химические ресурсы Рунета <http://www.ximicat.com/>
6. Химические серверы <http://www.Himhelp.ru>, ChemWeb, ChemExpress Online, ChemNet.com
7. <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать

более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой; -поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Модули и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
Модуль 1. Общая характеристика ФМИ. Методы масс-спектрометрии и дипольных моментов. Тема 1.Общая характеристика ФМИ	Проработать учебный материал по лекциям и учебной литературе. Ознакомиться по учебной, монографической литературе, по интернет-материалам с особенностями фрагментации органических соединений, применением масс-спектрометрии для анализа лекарственных форм.

<p>Модуль 1. Общая характеристика ФМИ. Методы масс-спектрометрии и дипольных моментов. Тема 2. Масс-спектрометрия.</p>	<p>Проработка материала по учебникам, лекциям, методической литературе. Ответить на вопросы и решить письменно задачи, данные в методическом пособии. Подготовиться к выполнению лабораторной работы.</p>
<p>Модуль 1. Общая характеристика ФМИ. Методы масс-спектрометрии и дипольных моментов. Тема 3. Метод дипольных моментов.</p>	<p>Проработать материал по лекциям и учебникам. Решить задачу (письменно) на определение структурного параметра (длины связи) заданной молекулы.</p>
<p>Модуль 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия. Тема 1. Основы спектральных методов исследования</p>	<p>Изучить природу электромагнитного излучения и его характеристику, процессы, протекающие при взаимодействии излучения с веществом. Происхождение атомных и молекулярных спектров. Проработать самостоятельно основы дифракционных методов. Проработать самостоятельно основы дифракционных методов исследования.</p>
<p>Модуль 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия. Тема 2. Колебательная спектроскопия. Спектроскопия комбинационного рассеяния.</p>	<p>По учебной литературе, методическим пособиям и лекциям проработать материал. Обратить особое внимание на применение ИК-спектроскопии для идентификации соединений и структурного анализа. Решить практические задачи на эти разделы. Представить реферат по применению ИК-спектрометрии для определения структуры органических соединений. Рассмотреть совместное применение ИК и КР-спектров. Проработать материал по учебной литературе и лекциям. Обратить внимание на особенности поглощения отдельных классов органических соединений, на применение метода в неорганической и координационной химии. Проработать методы расчета λ_{\max} для отдельных классов органических соединений.</p>
<p>Модуль 2. Методы оптической спектроскопии. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Микроволновая спектроскопия. Тема 3. Вращательная спектроскопия.</p>	<p>Ознакомиться с условиями получения вращательных спектров их применению в химии. Решить задачу на определение межатомного расстояния (длины связи) по данным вращательных спектров.</p>
<p>Модуль 3. Магнетохимические и резонансные методы исследования. Тема 1. Магнетохимические методы исследования.</p>	<p>Рассмотреть поведение вещества в магнитном поле, природу диа-, пара-, ферро- и ферримagnetизма. Рассмотреть экспериментальные методы Гуи и Фарадея.</p>
<p>Модуль 3. Магнетохимические и резонансные методы исследования. Тема 2. Резонансные методы исследования</p>	<p>Рассмотреть что такое электронный ядерный парамагнетизм, их природу. Проработать тестовый материал, вопросы и задачи для коллоквиума. Решить задачи по интерпретации ЯМР-спектров органических</p>

	соединений. По теме предлагается реферат.
--	---

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Физические методы исследования» используются следующие информационные технологии:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора и интерактивной доски.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа.
- Программы пакета Microsoft Office

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

В соответствии с требованиями ФГОС+ кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных и семинарских занятий по потокам студентов. Помещение для лекционных занятий укомплектовано техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).

Лабораторные занятия проводятся в специально оборудованных лабораториях с применением необходимых средств обучения (лабораторного оборудования, образцов, нормативных и технических документов и т.п.). Помещения лабораторных практикумов укомплектованы специальной учебно-лабораторной мебелью (в том числе столами с химически стойкими покрытиями), учебно-научным лабораторным оборудованием, измерительными приборами и химической посудой, в полной мере обеспечивающими выполнение требований программы по физической химии.

1. ИК-спектрометр Инфралюм ФТ 02. Область регистрации 8000-400 см⁻¹.
2. Спектрофотометр СФ-256. Область регистрации 180-800 нм.
3. Спектрофотометр SS1207 "Leki". Область регистрации 340-1000 нм.
4. Мост переменного тока Е 12-1А (измеритель емкости и индуктивности).
5. Весы аналитические Leki В1604.
6. Весы теххимические Leki В5002.
7. Торсионные весы.
8. Магнитные мешалки LS220.
9. Дистиллятор А-10.

10. Набор лабораторной посуды.

11. Необходимые реактивы.