

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Кафедра физической химии



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по НРиИ
К.Е. Афанасьев
_____ 2012 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ОД.А.05 «ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ
И СОСТАВА СОЕДИНЕНИЙ»**

*для аспирантов специальности
02.00.04 – Физическая химия*

*Квалификация (степень)
Кандидат наук*

Кемерово 2012 г.

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.04 - физическая химия, в соответствии с Программой-минимум кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» по химическим наукам, и учебным планом КемГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: Сахарчук Ю.П., доцент кафедры «Физическая химия», кандидат физико-математических наук.

Рабочая программа дисциплины
обсуждена на заседании кафедры физическая химия

Протокол № 7 от «28» 04 2012 г.

Зав. кафедрой ФХ _____ Кречетов А.Г.
(подпись) Ф. И. О

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета
протокол № 11 от 28.05.2012

Декан химического факультета

 А.А. Мороз

Начальник отдела аспирантуры и докторантуры

 М.И. Рябова

«25» 06 2012 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Физические методы исследования структуры и состава соединений» является углубленное изучение теоретических основ, практических возможностей и ограничений важнейших для химиков физических методов исследования, изучение современной аппаратуры и условий проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, в том числе публикуемые в научной литературе. Аспирант должен научиться также оптимальному выбору методов для решения поставленных задач и делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Физические методы исследования структуры и состава соединений» относится к дисциплинам по выбору аспиранта.

Задачи дисциплины:

- 1) сформировать базовые знания и умения в области методов исследования строения и структуры соединений для подготовки к научно-исследовательской работе;
- 2) раскрыть роль физико-химических методов исследований в работе химика;
- 3) рассмотреть основные экспериментальные закономерности физико-химических методов исследования и установления структуры органических соединений;
- 4) обеспечить овладение методологией применения физико-химических методов исследований соединений..

3. Требования к знаниям и умениям

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

иметь представление: о принципиальных возможностях физических методов в решении химических проблем;

знать: основы методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии.

– о возможностях физических методов в решении химических проблем;

– уметь: проводить структурный анализ органических соединений по данным УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.

4.1 Лекционные (теоретические) занятия

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1.	Общая характеристика и классификация методов	Физическая теория метода. Прямая и обратная задачи. Общая характеристика и классификация методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода.	2
2.	Методы масс-спектрометрии	Методы ионизации. Ионный ток и сечение ионизации. Потенциалы появления ионов. Вертикальные и адиабатические электронные переходы. Диссоциативная ионизация. Типы ионов в масс-спектрометрах. Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Разрешающая сила масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр.	2

		Спектрометр ион-циклотронного резонанса.	
3.	Теоретические основы спектроскопических методов исследования	Природа электромагнитного излучения, различные типы его взаимодействия с веществом (периодические изменения электрических и магнитных дипольных моментов). Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Спектры испускания, поглощения и рассеяния атомов, ионов и молекул. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина)..	2
4.	Проблемы получения и регистрации спектров	Принципиальная схема спектроскопических измерений. Основные узлы спектральной установки. Источники электромагнитного излучения. Монохроматизация излучения, блок-схемы спектрометров, их классификация. Характеристики спектральных приборов - разрешающая сила, дисперсия, светосила, аппаратная функция. Критерий Рэлея в оценке разрешающей силы.	2
5.	Методы определения геометрии молекул и веществ	Метод вращательной спектроскопии. Схема радиоспектрометра. Условия получения микроволнового спектра полярных молекул. Область частот. Матричный элемент дипольного момента перехода для полярных молекул. Типы спектров. Правила отбора. Использование Фурье-спектрометров для исследования вандер-ваальсовых молекул и малостабильных молекул. Определение дипольного момента молекул из микроволновых спектров. Определение геометрических параметров молекул из микроволновых спектров. Метод изотопного замещения.	2
6.	Методы колебательной спектроскопии.	Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Естественные координаты. Коэффициенты кинематического взаимодействия. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы. Симметрия нормальных колебаний, координаты симметрии. Анализ нормальных колебаний молекулы по экспериментальным данным.	2
7.	Методы электронной спектроскопии	Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах	2
8.	Электрооптические методы исследования.	Релеевское рассеяние света. Деполяризация при рассеянии на анизотропных молекулах. Анизотропия поляризуемости, коэффициенты деполяризации. Закон Керра. Связь молярной постоянной Керра с главными значениями поляризуемости молекул.	2
9.	Резонансные методы	Метод ЯМР. Физические основы явления 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. Применение спектров ЯМР в химии. Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. g-Фактор и его значение	2

Итого	18
--------------	-----------

4.2. Практические (семинарские) занятия - нет

4.3. Лабораторные занятия

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоёмкость, часов
1	2	3	4
1.	Проблемы получения и регистрации спектров	Изучение спектрофотометров фирмы Шимадзу. Оптические схемы, Устройства регистрации и программная обработка результатов.	6
2.	Методы колебательной спектроскопии.	ИК-спектроскопия органических соединений.	6
3.	Методы электронной спектроскопии	Прецизионная спектроскопия слабых полос поглощения.	6
Итого			18

4.4. Самостоятельная работа аспиранта

Наименование раздела дисциплины	Вид самостоятельной работы	Трудоёмкость, часов
1. Методы масс-спектрометрии	Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Роль разрешения, потенциалов появления, методов ионизации, метастабильных ионов. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей.	9
2. Теоретические основы спектроскопических методов исследования	Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих соответствующую спектральную область.	9
3. Проблемы получения и регистрации спектров	Различные типы светофильтров, области их применения. Приемники излучения (фотографические, фотоэлектрические, счет фотонов). Достоинства и недостатки фотоэлектрических детекторов. Понятие о шумах, различные типы шумов. Регистрация отдельных фотонов (счет фотонов).	9
4. Методы определения геометрии молекул и веществ	Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Стоксовы и антистоксовы линии КР. Определение геометрических параметров неполярных молекул.	9
5. Методы колебательной спектроскопии.	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. Использование изотопических разновидностей молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул.	9
6. Методы электронной спектроскопии	О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения.	9
7. Электрооптические методы исследования.	Совместное использование методов дипольных моментов, эффекта Керра, деполяризации релеевского рассеяния света и рефракции. Главные значения поляризуемости химических связей. Применения в конформационном анализе и исследованиях электронного строения молекул. Эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм.	9
8. Резонансные методы	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.	9
Итого		72

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Никольский А. Б., Баличева Т. Г., Белорукова Л. П. Физические методы исследования неорганических веществ. М.: «Академия/Academia», 2006 г. 400 стр.
2. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. М.: Техносфера, 2007. - 367 с.
3. Беккер Ю. Спектроскопия М.: Техносфера, 2009. - 527 с.
4. Васильев А.Н., Михайлин В.В. Введение в спектроскопию диэлектриков. М. Изд. МГУ. 2008.
5. Г.В.Смирнов, Д.Г.Смирнов. Физические методы исследования объектов окружающей среды: Учебное пособие.- Томск: Издательство Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, 2007.-167 с.
6. Пахомов Л.Г., Черноуков Н.Г., Сулейманов Е.В., Кирьянов К.В.. Физические методы исследования неорганических веществ и материалов. Нижний Новгород: Изд. Нижегородского государственного университета, 2006, 84 с.
7. Современные методы исследования конденсированных материалов. Лекции. Минск: изд. БГУ, 2008, 78с.

Дополнительная литература:

1. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия: Учеб. М.: Высш. шк., 1987. 366 с.
2. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М.: Высш. шк., 1989. 288 с.
3. Драго Р. Физические методы в химии: В 2 т. М.: Мир, 1981. Т. 1, 2.
4. Кузьменко Н.Е. Гл. 11. Спектроскопические методы // Основы аналитической химии. Кн. 2. Методы химического анализа. М.: Высш. шк., 1996. С. 199–352.
5. Калинин В.Т., Ракитин Ю.В. Введение в магнетохимию. М.: Наука, 1980.
6. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986., 496 с.
7. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР: Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981. 279с.
8. Бучаченко А.Л. Химическая поляризация электронов и ядер. М.: Наука, 1974. 246 с.
9. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. 478 с.

5.2. Информационное обеспечение дисциплины

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Студентам - книги - спектроскопия http://www.ph4s.ru/book_ph_spektroskop.html
2. Научная сеть <http://nature.web.ru/>
3. Введение в спектроскопию для учебных лабораторий <http://oceanoptics.ru/help/54-oilabbook.html>
4. Химфак МГУ. Лекции по спектроскопии http://spectran.blogspot.com/p/blog-page_02.html