

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Физико-химические методы исследований в химии

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Химия ионных и молекулярных систем

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Физико-химические методы исследований в химии**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
<p>СПК-1.С. Способность на основе фундаментальных химических знаний охватывать полную схему межпредметных и междисциплинарных взаимодействий при планировании и проведении научного эксперимента, на практике используя информационные и вычислительные технологии, современные методы и оборудование для синтеза и анализа</p>	<p>Знать: теоретические основы современных физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ и материалов Знать: возможности и ограничения применения физических методов исследования химических объектов Уметь: проводить измерения на научном оборудовании по разработанным методикам</p>
<p>СПК-4.С. Способность анализировать информацию при планировании эксперимента и обсуждении полученных результатов, включая аналитические и спектральные данные, в том числе с привлечением информационных баз данных; применять полученные в результате анализа данные для развития исследований, для докладов на конференциях, в научных публикациях</p>	<p>Знать: современные способы обработки и представления литературных и других данных Владеть: методами обработки качественных и количественных результатов спектральных исследований для интерпретации результатов эксперимента, в том числе для направленного синтеза</p>

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 102 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов- занятия семинарского типа, 24 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 42 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: современные методы физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ и материалов

Уметь: планировать и проводить эксперименты в области химии, обрабатывать и анализировать их результаты.

Владеть: способностью к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Методы определения	4	2	2				4			

<p>физических свойств. Общая характеристика и классификация методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы.</p> <p>Энергетические характеристики различных методов.</p> <p>Чувствительность и разрешающая способность метода.</p> <p>Характеристическое время метода.</p> <p>Интеграция методов</p>										
<p>Тема 2. Масс-спектрометрия.</p> <p>Принципы масс-спектрометрии.</p> <p>Блок-схема масс-спектрометра.</p> <p>Отношение массы к заряду. Масс-спектр. Молекулярные предшественники. Стабильные и метастабильные ионы.</p> <p>Фрагментация. Методы ионизации. Разрешающая сила масс-спектрометра. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами</p>	6	2	2				4	2		2
<p>Тема 3. Спектроскопические методы исследования. Природа электромагнитного излучения, Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы.</p> <p>Спектры испускания, поглощения</p>	6	2	2	2			6			

и рассеяния. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина). Принципиальная схема спектроскопических измерений в любой области спектра. Основные узлы спектральной установки. Источники электромагнитного излучения.										
Тема 4. Газовая электронография. Уравнения потока электронов для плоских и сферических волн. Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний. Кривая радиального распределения.	10	2	4	2			8	2		2
Тема 5. Инфракрасные (ИК) спектры и комбинационное рассеяние света. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Спектроскопия комбинационного	8	4	2	2			8			

<p>рассеяния (КР). ИК-спектроскопия твердых тел. Спектры пропускания, диффузного рассеяния, нарушенного полного внутреннего отражения, испускания. ИК-Фурье-спектроскопия, Фотоакустическая ИК-спектроскопия</p>											
<p>Тема 6. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Определение энергии диссоциации и других молекулярных постоянных. 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. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Хромофоры. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах</p>	6	2	2	2			6				

поглощения. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.										
Тема 7. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа. Рентгеновские методы исследования. Природа рентгеновских спектров. Края поглощения. Взаимосвязь рентгеновских спектров поглощения и характеристических спектров испускания. Зависимость частоты перехода краев поглощения или линий испускания от величины порядкового номера элемента (закон Мозли). Классификация рентгеновских методов анализа.	10	4	2	2			8	2		2
Тема 8. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоско-поляризованного света. Спиральная модель оптической	10	2	4	2			8	2		2

активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения.										
Тема 9. Оптический круговой дихроизм. Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей. Нормальная дифракция и закон Фриде-ля. Рассеяние рентгеновских лучей с длиной волны, близкой к поглощению, аномальное рассеяние. Определение абсолютной конфигурации молекул.	10	4	2	2			8	2		2
Тема 10. Магнетохимические и электрооптические методы исследования. Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная	8	2	4	2			8			

<p>проницаемость и магнитная восприимчивость вещества. Природа явлений диа-, пара-, ферро- и ферромагнетизма. Диамагнетизм вещества и аддитивная схема Паскаля. Примеры структурного анализа в органической химии с помощью магнетохимического метода. Природа парамагнетизма.</p>										
<p>Тема 11. Релеевское рассеяние и эффект Керра. Релеевское рассеяние света. Деполяризация при рассеянии на анизотропных молекулах. Анизотропия поляризуемости, коэффициенты деполяризации. Закон Керра. Эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм. Уравнение для вращения плоскости поляризации света в магнитном поле.</p>	8	4	2	2			8			
<p>Тема 12. Метод ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. 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</p>	8	2	4	2			8			

мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Метод двойного резонанса. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров.										
Тема 13. Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g-Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Метод ЯКР. Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем. Мессбауэровская спектроскопия. γ -Резонансная ядерная флуоресценция, эффект Мессбауэра.	6	2	2	2			6			
Тема 14. Метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Теоретические основы метода: Измерение тепловых эффектов, теплоемкости, расчет температурного вклада в	6	2	2	2			6			

энтальпию, оценка энтропии, построение фазовых диаграмм. Другие физикохимические методы. Неэластичное рассеяние нейтронов как метод исследования твердых материалов. Методы SIMS, UPS, FEM, HREELS, FABMS										
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36					6	6			32
Итого	144	36	36	24		6	102	10		42

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Анализ литературных данных, составление подборки статей из научных журналов по применению различных спектральных методов для идентификации элементоорганических соединений.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д., Спектрометрическая идентификация органических соединений, М.,Бином. Лаборатория знаний 2011.
- Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Бокаун, ЯМР в одном и двух измерениях, М., Мир 1990.

- Д. Браун, А. Флорд, М. Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ, М., Мир 1992.
- Смит А., Прикладная инфракрасная спектроскопия, пер. с англ., М., 1982

Дополнительная литература

- А. Барнс, В. Дж. Орвил-Томас, Колебательная спектроскопия. Современные воззрения и тенденции, М., 1981
- К. Зигбан, К. Нордлинг, А. Фальманидр. Электронная спектроскопия, М., Мир, 1971
- Л. Титце, Т. Айхер. – Препаративная органическая химия. М., Мир, 1999.12. Язык преподавания – русский
- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

Проф. Локшин Б.В., bloksh@ineos.ac.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для экзамена:

1. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.
2. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.
3. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатом-ных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.
4. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Ее проявления в свойствах молекул.
5. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул.
6. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: теоретические основы современных физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ и материалов</p> <p>Знать: возможности и ограничения применения физических методов исследования химических объектов</p> <p>Знать: современные способы обработки и представления литературных и других данных</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь:</p> <p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: проводить измерения на научном оборудовании по разработанным методикам</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: методами обработки качественных и количественных результатов спектральных исследований для интерпретации результатов эксперимента, в том числе для направленного</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>

синтеза	
---------	--