

**Приднестровский государственный университет
им. Т.Г. Шевченко**

Естественно-географический факультет

Кафедра химии и методики преподавания химии



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

для набора 2016 года

Учебной ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.Б.21 "ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ"

Направление подготовки:

04.05.01.

«Фундаментальная и прикладная химия»

Специализации

«Фармацевтическая химия»

«Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность»

«Химическая технология»

квалификация (специалист)

«Химик. Преподаватель химии.»

Форма обучения:

очная

Тирасполь 2019

Рабочая программа дисциплины «**Физические методы исследования**» /сост. А.И. Дикусар – Тирасполь: ГОУ ПГУ, 2019 – 18 с.

Рабочая программа предназначена для преподавания дисциплины *Б1.Б.21 "ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ"* базовой части учебного плана очной формы обучения *по специальности 04.05.01. "Фундаментальная и прикладная химия"*

Рабочая программа составлена с учетом Федерального Государственного образовательного стандарта профессионального образования **по специальности 04.05.01. "Фундаментальная и прикладная химия"**, утвержденного *приказом № 1174 от 12.09.2016г Министерством образования и науки РФ.*

Составитель:

Дикусар А.И., профессор кафедры химии и МПХ



1. Цели и задачи дисциплины.

Развитие химии невозможно без широкого использования в химических исследованиях достижений физики и её новых методов. Взаимопроникновение химии и физики имеет большое значение для развития естественных наук и способствует их взаимному обогащению. Арсенал современных физических методов в химии настолько обширен и применение их настолько разнообразно, что требуется систематическое изучение теоретических принципов и их практическое использование.

Целями освоения дисциплины «Физические методы исследования» являются освоение студентами методологии различных физических методов исследований химических соединений и овладение практическими навыками использования методов, доступных широкому кругу исследователей, а также знакомство с реже применяющимися, но весьма важными для химии методами получения сведений о строении молекул.

2. Место дисциплины в структуре ООП специалиста

2.1. Дисциплина Б1.Б.21 «Физические методы исследования» относится к обязательным дисциплинам вариативной части базового цикла дисциплин основной образовательной программы по специальности 04.05.01. "Фундаментальная и прикладная химия".

2.2. Курс «Физические методы исследования» является промежуточным этапом профессиональной подготовки специалиста-химика. Методология курса предполагает тесную связь с другими дисциплинами: неорганической, органической, физической химией, квантовой механикой, математикой. Для ее изучения необходимы знания, умения и компетенции по химии, физике, математике, квантовой химии, в объеме, предусмотренным государственным образовательным стандартом.

2.3. Изучение дисциплины необходимо для знаний, умений и навыков, формируемых последующими дисциплинами/практиками:

Дисциплина "Физические методы исследования" содержательно взаимосвязана с дисциплинами "Высшая математика", "Физика", "Неорганическая химия", "Аналитическая химия", "Физическая химия", "Органическая химия". Изучение дисциплины «Физические методы исследования» способствует дальнейшему освоению профильных дисциплин и выполнения квалификационной работы.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины.

Изучение дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих общекультурных (ОК), обще-профессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть
1.	ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Основные законы и понятия координационной химии; основные этапы развития и современное состояние координационной химии.	формулировать задачи, необходимые для реализации профессиональных функций, а также использовать для их решения методы изученных наук	Навыками проведения научных исследований в области координационных соединений, интернет технологиями

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть
2.	ОК-7	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала	основные понятия и законы координационной химии; основные этапы развития координационной химии, ее современное состояние	Уметь пользоваться научной литературой, интерпретировать исследования, грамотно и излагать материал	Навыками проведения научных исследований, интернет технологиями
3.	ОПК-1	способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	• основные положения теории строения координационных соединений, теории химической связи, теории кислот и оснований, теории растворов; • закономерности химических превращений и синтеза координационных соединений.	• определять продукты реакций координационных соединений по известным исходным веществам; • выполнять исходные вычисления, итоговые расчеты с использованием статистической обработки результатов; • самостоятельно работать с учебной и справочной литературой по координационной химии.	• операциями при выполнении лабораторных опытов по практике координационной химии; • техникой работы с химической посудой, взвешиванием веществ и сбором установок для выполнения опытов; • методами синтеза координационных соединений; • методами установления состава и строения координационных соединений;
4.	ОПК-2	владением навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	• основные положения теории строения координационных соединений, теории химической связи, теории кислот и оснований, теории растворов; • закономерности химических превращений и синтеза координационных соединений.	• проводить лабораторные опыты, объяснять суть конкретных реакций, оформлять отчетную документацию по экспериментальным данным; • выполнять исходные вычисления, итоговые расчеты с использованием статистической обработки результатов; • самостоятельно работать с учебной и справочной литературой по координационной химии.	• операциями при выполнении лабораторных опытов по практике координационной химии; • техникой работы с химической посудой, взвешиванием веществ и сбором установок для выполнения опытов; • методами синтеза координационных соединений; • методами установления состава и строения координационных соединений;
5.	ОПК-3	способностью использовать теоретические основы фундаментальных	• основные положения теории строения координационных соединений,	• проводить лабораторные опыты, объяснять суть конкретных реак-	• операциями при выполнении лабораторных опытов по практике координа-

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть
		разделов математики и физики в профессиональной деятельности	теории химической связи, теории кислот и оснований, теории растворов; • закономерности химических превращений и синтеза координационных соединений.	ций, оформлять отчетную документацию по экспериментальным данным; • выполнять исходные вычисления, итоговые расчеты с использованием статистической обработки результатов; • самостоятельно работать с учебной и справочной литературой по координационной химии.	онной химии; • техникой работы с химической посудой, взвешиванием веществ и сбором установок для выполнения опытов; • методами синтеза координационных соединений; • методами установления состава и строения координационных соединений;
6.	ОПК-5	способностью к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	• основные положения теории строения координационных соединений, теории химической связи, теории кислот и оснований, теории растворов; • закономерности химических превращений и синтеза координационных соединений.	формулировать задачи, необходимые для реализации профессиональных функций, а также использовать для их решения методы изученных наук	методиками измерений и интерпретации данных
7.	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты	основы методов планирования и проведения научных и практических экспериментальных исследований	Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	грамотно использовать оборудование, приборы, самостоятельно спланировать и точно провести эксперимент, математически обработать и обобщить результаты исследований.
8.	ПК-2	владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	основы методов планирования и проведения научных и практических экспериментальных исследований	Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	грамотно использовать оборудование, приборы, самостоятельно спланировать и точно провести эксперимент, математически обработать и обобщить результаты исследований.
9.	ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий и методологических	Теоретические основы современной координационной химии	На основе фундаментальных теоретических знаний обоснованно выбирать соответ-	Методологией освоения и получения профессиональных знаний по дисциплине.

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть
		аспектов химии, формами и методами научного познания		ствующий метод исследования для решения конкретной практической задачи, самостоятельно работать с учебной и справочной литературой по координационной химии;	
10.	ПК-4	способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	основные теоретические положения в области координационной химии	применять знания естественнонаучных дисциплин для анализа и обработки результатов химических экспериментов	навыками использования теоретических основ базовых разделов естественнонаучных дисциплин при решении конкретных химических и материаловедческих задач
11.	ПК-5	способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций	- основные положения теории строения координационных соединений, теории химической связи, теории кислот и оснований, теории растворов; - закономерности химических превращений и синтеза координационных соединений.	правильно и технически грамотно поставить и химически грамотно пояснить и решить конкретную задачу в рассматриваемой области	Навыками проведения научных исследований, интернет технологиями
12.	ПК-6	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	Базовые приемы и методы научных исследований	Уметь интерпретировать результаты исследования.	Навыками проведения научных исследований, интернет технологиями
13.	ПК-7	готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов)	Методику оформления научных исследований	Грамотно представлять выводы и результаты научных исследований	Алгоритмом оформления научных статей

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть
		дов, рефератов и статей в периодической научной печати)			

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: теоретические основы физических методов изучения и исследования молекул и химических реакций.

Уметь: применять освоенные физические методы исследования для определения строения молекул, изучения химических реакций интерпретировать экспериментальные результаты;

Владеть: методами расчета характеристик молекул и физико-химических процессов, приемами экспериментальной деятельности для определения физико-химических величин и структуры вещества.

4. Структура и содержание дисциплины «Физические методы исследования»

4.1. Распределение трудоемкости дисциплины и видов учебной работы по семестрам

Семестр	Количество часов						Форма итогового контроля
	Трудо- емкость, з.е./часы	В том числе					
		Аудиторных				Самост. работы	
		Всего	Лекций	Лаб. раб.	Практич. занятия		
7	3/108	40	20	28		24	Экзамен
Итого:	3/108	40	20	28		24	36

4.2. Разделы дисциплины, виды учебной работы и формы текущего контроля.

4.2.1 Распределение лекций по семестрам:

№ тем	№ занятия	Наименования темы, вопросы занятия	Кол-во часов по форме обуч.
			Дневн.
1	1	Предмет и метод исследования физики, химии, физической химии. Физико-химические методы исследования и их классификация: 1) методы разделения смесей; 2) методы определения состава и структуры химических соединений; 3) методы качественного и количественного анализа газовых смесей, растворов и твердой фазы; 4) методы исследования химических реакций; 5) методы физического, математического и других методов моделирования химических соединений и реакций.	2

2	2	Физико-химические методы разделения и концентрирования. Классификация и основные теории. Центрифугирование. Адсорбционные методы, фильтрация и мембранные методы. Экстракция. Хроматография. Ионный обмен.	2
3	3	Физико-химические методы определения состава и структуры химических соединений. Классификация и основы теории. Спектроскопия. Классификация спектральных методов и их применение для определения состава и структуры.	2
	4	Рентгеноспектральный и рентгенофазовый анализ, его применение для определения состава и структуры химических соединений	2
	5	Фотометрический анализ (колориметрия, фотоколориметрия, спектрофотометрия) и его использование для качественного и количественного анализа.	2
	6	ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеивания. Их применение к определению структуры химических соединений и в аналитических целях.	2
	7	Электронный парамагнитный резонанс и спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Эффект Месбауэра.	2
4	8	Электрохимические методы анализа. Потенциометрия и потенциометрическое титрование. Полярография и амперометрическое титрование.	2
5	9	Кинетические методы исследования химических реакций. Катализ и автокатализ. Физико-химические методы исследования микроскопического механизма реакций. Кинетические методы анализа.	2
6	10	Радиометрический (изотопный) метод анализа. Основы теории. Особенности и эффективные области применения.	2
		Итого	20

4.2.2 Практические занятия:

№	Содержание практических занятий	Кол-во часов
1	Статистические методы, анализы и обработка наблюдений. Случайные величины. Нормальное распределение. Основная схема производства наблюдений. Средняя и дисперсия выборки. Ошибки. Виды ошибок. Среднее квадратичное отклонение отдельного измерения и генеральной совокупности. Точность измерений. Абсолютная и относительная ошибка. Метод наименьших квадратов. Линеаризация экспериментальных зависимостей. Чувствительность и точность физико-химических методов анализа. Решение практических задач по определению систематических, случайных ошибок и использование метода наименьших квадратов в физико-химических методах исследования.	2
2	Закон Ламберта-Бера. Колориметрия, фотоколориметрия и спектрофотометрия. Решение практических задач по применению закона Ламберта-Бера.	1
3	Модульный контроль по лекциям №№1-5 и практическим занятиям 1-2.	1
4	Колебательные спектры соединений. ИК-спектроскопия. Расшифровка ИК-спектров. Определение соединений по их ИК-спектрам.	2
5	Уравнение Нернста и расчеты равновесных потенциалов систем металла и окислительно-восстановительных систем.	2
6	Электрохимические методы анализа. Расчетные задачи по электрохимическим методам анализа (потенциометрическое титрование, полярографиче-	2

	ский анализ, электровесовой анализ).	
7	Кинетические методы исследования химических реакций. Расчетные задачи по кинетическим методам исследования и кинетическим методам анализа.	1
8	Модульный контроль по лекциям №№ 6-10 и и практическим занятиям №№ 4-7.	1
	Итого:	12

4.2.3 Лабораторные работы:

№ п/п	Содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	Фотоколориметрия. Определение железа (III) в виде роданида методом калибровочного графика.	4
2	Потенциометрическое кислотно-основное титрование. Определение кислоты в растворе.	4
3	Кондуктометрическое определение концентрации сульфат-иона в растворе	4
4	Определение меди в алюминиевом сплаве методом внутреннего электролиза.	4
	Итого:	16

4.2.4 Самостоятельная работа студентов:

№ п/п	Содержание	Кол-во часов
1	Методы разделения и концентрирования элементов и соединений. Центрифугирование. Ультрацентрифугирование. Фильтрация. Ультрафильтрация. Разновидности хроматографии. Бумажная хроматография. Тонкослойная хроматография. Газожидкостная хроматография. Мембранные методы. Обратный осмос. Экстракция. Ионный обмен. Электрофорез.	4
2	Физико-химические методы определения состава и структуры химических соединений. Эмиссионный спектральный анализ. Рентгеноспектральный анализ. Рентгенофазовый анализ. Колориметрия. Фотоколориметрия. Спектрофотометрия. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеивания. Электронный парамагнитный резонанс и спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Термохимический анализ. Термогравиметрия.	4
3	Физико-химические методы анализа и исследования химических соединений. Химический люминисцентный анализ. Магнетохимия и метод статической магнитной восприимчивости.	4
4	Электрохимические методы анализа. Потенциометрия и потенциометрическое титрование. Кондуктометрический анализ. Электровесовой анализ. Полярография и амперометрическое титрование. Современные методы электрохимического исследования и анализа.	4
5	Кинетические методы исследования химических и электрохимических реакций. Катализ и автокатализ. Физико-химические методы исследования микроскопического механизма реакций. Кинетические методы анализа.	4
6	Радиометрический (изотопный) метод анализа и его применение в исследованиях, решение экологических задач, сельском хозяйстве, медицине, промышленности.	4
	Итого:	24

5. Примерная тематика курсовых проектов (работ).

Учебным планом курсовые работы не предусмотрены

6. Образовательные технологии.

Для эффективной реализации целей и задач ФГОС ВО, для воплощения компетентностного подхода в преподавании дисциплины используются следующие образовательные технологии и методы обучения:

1. Технология проблемного обучения при изложении лекционного материала в форме: лекция-визуализация, лекция-объяснение с привлечением элементов дискуссии, беседы.

2. Технология проблемного и активного обучения с использованием творчески репродуктивных методов в групповой и индивидуальной форме с целью организации активности студентов в условиях, близких к будущей профессиональной деятельности, с использованием личностно деятельного характера усвоения знаний, приобретения навыков, умений при выполнении лабораторных работ.

3. Технология проблемного, модульного дифференцированного обучения путем рассмотрения проблемных познавательных задач, с использованием индивидуального темпа обучения с целью развития творческой и познавательной самостоятельности и обеспечения индивидуального подхода с учетом динамики работоспособности студента – при проведении практических занятий, что обеспечивается применением электронного задачника в компьютерном классе.

4. Технология концентрированного, дифференцированного обучения в индивидуальной форме – при самостоятельном выполнении индивидуальных заданий с целью развития познавательной самостоятельности, творческих способностей и умений, развития навыков работы с лекционным материалом, рекомендованной литературой, справочной информацией.

6.1. Образовательные технологии в интерактивной форме, используемые в процессе преподавания дисциплины:

На занятиях по химическим свойствам неорганических соединений студентам показываются видеозаписи демонстраций трудновоспроизводимых в реальных условиях или представляющих опасность для здоровья лабораторных опытов, фрагменты обучающих видеофильмов.

Перед показом видеозаписей формулируется цель просмотра, после чего студентам задается 3-5 ключевых вопросов, которые являются основой для последующего обсуждения.

Всего 50 % интерактивных занятий от объема аудиторной работы.

6.2. Примеры образовательных технологий в интерактивной форме:

1. компьютерная симуляция
2. проблемная лекция
3. дискуссия

6.3. Электронные образовательные ресурсы, используемые в процессе преподавания дисциплины:

<http://www.alleng.ru/edu/chem9.htm> - образовательные ресурсы Интернета – Химия

<http://himkniga.com/> - книги по химии

<http://www.chem.isu.ru/leos/index.php> - справочно-информационная система “Химический ускоритель”

<http://www.chemweb.com/> - научный портал (содержит базы данных по химии)

7. Оценочные средства для контроля успеваемости и результатов освоения дисциплины.

7.1. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации, виды оценочных средств:

№ п/п	№ семестра	Формы контроля	Наименование раздела дисциплины	Оценочные средства		
				Виды	Кол-во вопросов в задании	Кол-во независимых вариантов
1	2	3	4	5	6	7
1.	6	Контроль освоения темы	1-10	собеседование по ситуационным задачам	1	6
2.	6	Контроль освоения темы (контроль лабораторной работы)	5-6	собеседование по лабораторным работам	5	1
3.	6	Контроль освоения ряда тем (контрольные работы)	1-8	письменный контроль	5	6/12
4.	6	экзамен	1-10	устный контроль	3/25	25

Виды оценочных средств:

1. Собеседование по ситуационным задачам
2. Собеседование по лабораторным работам.
3. Письменный текущий контроль освоения темы (контрольные работы).
4. Письменный контроль промежуточной аттестации (экзамена).

7.2. Примеры оценочных средств:

7.2.1. Примеры заданий и вопросов контрольных работ

Электронная спектроскопия.

1. В каких координатах необходимо представить спектр с исчерпывающей информацией?
2. Каковы общие принципы допущения метода МО ЛКАО?
3. Каким образом классифицируются МО?
4. На каком основании в некоторых учебниках приводятся укороченные энергетические диаграммы МО органических соединений?
5. Приведите примеры соединений, в ЭСП которых проявляются бато- и гипсохромное смещение полос?
6. Как с позиции теории МО ЛКАО объяснить концепцию хромофорного и ауксохромного влияния на поглощения излучения?
7. Объясните различия энергетических диаграмм МО октаэдрических комплексов, рассчитанных:
 - а) с учётом лишь сигма-связей металл-лиганд;
 - б) с учётом и сигма- и пи-связей металл-лиганд.
8. Какие результаты квантово-механического расчёта используются для предсказания спектров сложных молекул?

9. Какие факторы влияют на значение молярного коэффициента экстинкции?
10. Орбитали каких атомов в комплексных соединениях рассматриваются в ТКП? Нарисуйте эти орбитали.
11. Объясните тот факт, что спектр многоатомной молекулы имеет несколько полос, а не одну.

Колебательная спектроскопия.

1. Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции классической механики?
2. Какие характеристики двухатомной молекулы влияют на чистоту ее колебания? Напишите уравнение этой зависимости.
3. Каков результат рассмотрения модели гармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
4. Каков результат рассмотрения модели ангармонического осциллятора с позиции квантовой механики?
5. Предскажите и сравните ИК-спектры гармонического и ангармонического осцилляторов.
6. Справедливо ли утверждение «чем больше частота колебательного перехода, тем больше его интенсивность»?
7. В чем заключается различие понятий «нормальная координата» и «естественная координата»?
8. Чем вызвана необходимость введения понятия нормальной координаты многоатомной молекулы?
9. Объясните, почему для молекул Br_2 , O_2 и других гомоядерных двух-атомных молекул не удаётся зарегистрировать ИК- спектр?
10. Какие классификации нормальных колебаний Вам известны? Приведите примеры.
11. Приведите примеры и сравните частоты колебаний разной формы у одной и той же группы атомов.
12. Какие факторы влияют на частоту и интенсивность полосы поглощения определённой группы атомов?

Колебательно-вращательная спектроскопия.

1. Какие из представленных молекул – HCl , H_2 , Cl_2 , C_2H_4 , CH_3Cl , CCl_4 , CHCl_3 , C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ можно исследовать методами вращательной и колебательно-вращательной спектроскопии?
2. Вычислите и нарисуйте энергетическую диаграмму вращательных уровней, в которой вращательное квантовое число равно 0, 1, 2, 3, 4.
3. Объясните факт наличия большого числа линий и прохождение интенсивности их через максимум во вращательном спектре.
4. Докажите, что симметричного волчка один момент инерции отличается от двух других одинаковых моментов инерции.
5. Имеются ли различия в колебательно-вращательных спектрах молекул CO_2 и HCN ? Ответ обоснуйте.
6. У молекул N_2O и NO_2 имеется по 3 основных колебания, некоторые из них видны одновременно в ИК и КР – спектрах. Полосы N_2O имеют простой PR – контур, полосы NO_2 – сложную вращательную структуру. Каково строение молекул?

Рефрактометрия

1. Какие из приведённых ниже выражений относятся к абсолютному показателю преломления, какие – к относительному?
 - а) отношение синуса угла падения луча в первой среде к синусу угла падения во второй среде;
 - б) отношение угла падения луча во второй среде к углу падения в первой среде;

- в) отношение абсолютного показателя преломления 2-го вещества к абсолютному показателю преломления 1-го вещества;
 - г) отношение скорости света в пустоте к скорости света в веществе;
 - д) отношение скорости света в первой среде к скорости света во второй среде;
 - е) произведение показателя преломления воздуха и показателя преломления вещества, измеренного по отношению к воздуху.
 - ж) произведение 1,00027 и измеренного показателя преломления исследуемого вещества.
2. Зависимость показателя преломления от длины волны называют:
- а) рефракцией;
 - б) дисперсией
 - в) экзальтацией
 - г) поляризацией
 - д) аномалией
 - е) поляризуемостью.
3. Каковы причины наличия экзальтации молекулярной рефракции?
- а) сопряжение связей в молекуле;
 - б) усреднение результатов расчёта по аддитивной схеме;
 - в) ошибка эксперимента;
 - г) наличие нециклической сопряжённой системы у молекулы, конденсированных колец, сопряженных колец.
4. В каких случаях зависимость показателя преломления от состава раствора прямолинейна?
- а) для идеальных растворов, если измерялся n_D или n_F ;
 - б) для неокрашенных растворов;
 - в) для идеальных растворов, если состав раствора выражен в объёмных долях или процентах;
 - г) для смесей жидкостей, кипящих при близких температурах.
5. Одинаково ли значение молекулярной рефракции одного и того же вещества, вычисленное и по n_D и по n_F ?
- а) одинаково;
 - б) R_c больше R_F , т.к. F – лучи поглощаются веществом;
 - в) R_c меньше R_F , т.к. для C - лучей связевые рефракции меньше;
 - г) R_c больше R_F , имеем дело с аномальной дисперсией.
6. Что называют молекулярной дисперсией, обладает ли она свойством аддитивности?
- а) неаддитивное отклонение теоретически вычисленной молекулярной рефракции для $20^\circ C$ от экспериментальной;
 - б) разность молекулярных рефракций для двух длин волн; аддитивна, т.к. это разность аддитивных величин;
 - в) произведение удельной дисперсии и молярной массы; аддитивно;
 - г) разность показателей преломления, вычисленная по дисперсионным формулам; аддитивна;
7. Каким образом можно получить сведения о молекулярной рефракции твёрдого вещества?
- а) измерить показатель преломления, вычислить рефракцию;
 - б) для твёрдых веществ показатель преломления практически определить нельзя;
 - в) растворить вещество, измерить n х раствора и, используя свойство аддитивности удельной рефракции раствора, зная концентрацию его, вычислить удельную рефракцию растворённого вещества, затем – молекулярную;
 - г) по показателю преломления раствора и плотности твёрдого вещества рассчитываем молекулярную рефракцию, из которой вычтем молекулярную рефракцию растворителя.

ЭПР – спектроскопия

1. Сколько пиков со сверхтонкой структурой можно ожидать вследствие делокализации неспаренного электрона в катионе дибензолхрома между кольцами?

2. Предскажите спектр ион-радикала хлорбензола при условии, что разрешены все сверхтонкие линии.
3. Для какого бимолекулярного процесса – с константой скорости 107 или 1010 – уширение линии при прочих равных условиях будет больше?
4. Сколько линий можно ожидать в спектре гипотетической молекулы SCl_3 (для S $I = 0$, для Cl $I = 3/2$)?
5. Предскажите число спектральных линий для:
 - а) $\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2^{2+6}$
 - б) $\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_2^{2+6}$

Объясните, как должны проявляться в этих примерах расщепление в нулевом поле и крамерсово вырождение.

Метод ЯМР

1. В гипотетическом парамагнитном комплексе $\text{M}(\text{en})_2\text{Cl}_2$ спектроскопически не обнаружено примесей вещества $\text{M}(\text{en})_2\text{ClH}_2\text{O}^+$. Как установить, не происходит ли быстрое образование такой примеси, подвергаясь ещё более быстрому превращению по реакции

$$\text{M}(\text{en})_2\text{ClH}_2\text{O}^+ + \text{Cl} = \text{M}(\text{en})_2\text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O}?$$
2. В отсутствие какого-либо обмена два пика А-Н и В-Н отстоят друг от друга в спектре ЯМР на 250 гц. При комнатной температуре происходит обмен и пики отстоят друг от друга на 25 гц. Время спин-решеточной релаксации А-Н и В-Н велико, и оба соединения представлены в одинаковых концентрациях (0,2 М). вычислите время жизни протона у А и отсюда найдите константу скорости обмена (укажите единицы).
3. В данном соединении MF_4 (для M $I = 1/2$) значение JМ-Ф равно 150 гц. В отсутствие химического обмена сигналы F- и М-Ф отстоят друг от друга на 400 гц. При комнатной температуре F- и MF_4 обмениваются с такой скоростью, что тонкая структура начинает исчезать. Предположив наличие одинаковых концентраций М-Ф и F- и отсутствие стабильных промежуточных веществ, вычислите для F. Каким должно быть расстояние между пиками MF и F- при этих условиях?
4. Спектр тетрагидрофурана $(\text{CH}_2)_4\text{O}$ является сложным и относится к типу A_2B_2 . Объясните, как можно использовать метод двойного резонанса для интерпретации этого спектра.
5. Определите число изомеров циклических соединений с формулой $\text{P}_3\text{N}_3(\text{CH}_3)_2\text{Cl}_4$ и предскажите спектр резонанса фосфора для каждого из них (в предположении, что J, JP-Н мало и можно пренебречь JP-Н для атомов фосфора, не связанных с метильными группами.).
6. В каком из спектров и почему пик ЯМР- N14 должен быть уже – в NH_3 или NH_4^+ ? (Для N14 $I = 1$).
7. Как должен выглядеть спектр ЯМР PF_5 при следующих условиях (F(a) -F (b) JF (a) –F (b)):
 - а) при очень медленном обмене фтора;
 - б) при быстром межмолекулярном обмене фтора;
 - в) при быстром внутримолекулярном обмене фтора.

Масс-спектрометрия

1. В чём состоит фокусирующее действие магнитного поля анализатора в масс-спектрометре?
2. Что называется разрешающей силой масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
3. Что называется чувствительностью масс-спектрометра и чем она определяется? Каковы пути её увеличения?
4. На чём основана идентификация ионов в масс-спектре?
5. Как устанавливается брутто-формула вещества?
6. Приведите примеры закономерностей диссоциативной ионизации органических соединений.
7. Как определяются потенциалы ионизации молекул? Почему при фотоионизации точность определения потенциалов ионизации наивысшая?
8. В чём состоит различие вертикальных и адиабатических потенциалов ионизации?

9. Как определяются энергии разрыва химических связей? Какие данные нужны для их определения?

ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

1. Термодинамический масс-спектрометрический эксперимент.
2. Методы исследования ион-молекулярных реакций.
3. Спектроскопия ион-циклотронного резонанса.
4. Рефрактометрия.
5. – резонансная спектроскопия
6. Метод электрического резонанса.
7. Теоретические основы и области применения ЭПР – спектроскопии.
8. Теоретические основы и области применения метода ЯМР.
9. Сравнительные характеристики методов UV-VIS - и ИК – спектроскопии.

7.2.2. Вопросы к экзамену

1. Правила отбора в ИК-спектроскопии. Обертоны.
2. Эффект Штарка.
3. Гармонические и ангармонические колебания. Силовая постоянная.
4. Комбинационное рассеяние света.
5. Спектры комбинационного рассеяния.
6. Групповые колебания.
7. Вращательная спектроскопия. Модель жесткого ротатора.
8. Гармонический осциллятор. Ангармоничность.
9. Условия появления вращательных спектров.
10. Применение ИК-спектроскопии. Метод базовой линии.
11. Анализ колебательно-вращательных спектров.
12. ИК-спектроскопия – основные положения и правила отбора.
13. Поляризованные и деполаризованные линии в спектрах КР.
14. Обертоны в ИК-спектрах.
15. Сопоставьте возможности методов спектроскопии (электронной, колебательной, вращательной, колебательно-вращательной) в исследованиях строения молекул.
16. Блок-схема спектрометра ЯМР и принцип его действия.
17. Колебания ангармонического осциллятора.
18. Изотропное и анизотропное сверхтонкое взаимодействие.
19. Вращательный спектр жесткого ротатора.
20. Химический сдвиг в спектрах ЯМР.
21. Предсказание с позиций ТКП различия электронных спектров поглощения тетраэдрического и квадратного комплексного ионов одного и того же металла.
22. Характеристики электронных спектров многоатомных молекул.
23. Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ЯМР.
24. Правила отбора в электронной спектроскопии поглощения.
25. Колебания многоатомных молекул.
26. Электронные спектры поглощения органических соединений.
27. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
28. Электронные спектры поглощения комплексных соединений 3d-металлов с позиций метода МО ЛКАО.
29. Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул.
30. Причины, вызывающие усложнение интерпретации ИК-спектров сложных молекул.

31. Эффект Зеемана для молекулы O₂.
32. Расчет энергетических вращательных уровней жесткого ротатора.
33. Правила отбора в электронной спектроскопии поглощения.
34. Можно ли зарегистрировать электронные, колебательные, вращательные, колебательно-вращательные спектры поглощения молекул O₂, SO₂, NH₃, CHN, C₂Cl₄. Объясните особенности спектров.
35. Эффект Зеемана для магнитных ядер.
36. Типы электронных переходов многоатомной молекулы органического соединения, их характеристики, проявления в спектрах.
37. Спектроскопия комбинационного рассеяния света
38. Объясните с позиций ТКП электронные спектры поглощения комплексных соединений.
39. Колебания гармонического осциллятора.
40. Сверхтонкое взаимодействие в спектрах ЯМР.
41. Парамагнитный и диамагнитный эффекты.
42. Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул.
43. Классификация нормальных колебаний многоатомной молекулы по форме и симметрии.
44. Расчет силы осциллятора электронного перехода.
45. Сопоставить правила отбора, возможности методов ИК- и КРС-спектроскопии.
46. Вращательный спектр молекулы типа симметричного волчка.
47. Каким образом, имея ИК-спектр поглощения, вычислить частоту колебаний гармонического осциллятора и коэффициент ангармоничности?
48. Характеристики всех типов электронных переходов в спектрах органических молекул. Факторы, влияющие на эти характеристики.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (печатные, электронные издания, интернет и другие сетевые ресурсы).

8.1. Основная литература

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, 2006.
2. Физические методы исследования неорганических веществ. Под ред.Никольского А.Б. – М.: Академия, 2006.

8.2. Дополнительная литература

1. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. –М.: Высш. шк., 1987.
2. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. резонансные и электрооптические методы.- М.: Высш. шк., 1989.
3. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1, т. 2. – М.: Мир, 1981.
4. Иоффе Б.Б., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. – М.: Высш. шк., 1984.
5. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- спектроскопии в органической химии.-М.: Высш. шк., 1971.
6. Бенуэл К. основы молекулярной спектроскопии. – М.:, 1985.
7. Уитли П. Определение молекулярной структуры. – М.: Мир, 1970.
8. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение и реакционная способность. – М.: Химия, 1987.

9. Каррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. – М.: Мир, 1970.
10. Ионин Б.И., Ершов Б.А. ЯМР – спектроскопия в органической химии. – Л.: Химия, 1967.
11. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
12. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. – Л.: Химия, 1974.
13. Блюмх Б. Основы ЯМР. – М.: Техносфера, 2007.

8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. MS-Excel
2. Microsoft Office Word
3. <http://www.xumuk.ru/>
4. <http://www.studarhiv.ru/dir/cat16/subj19/file932/view932.html>
5. <http://www.alhimik.ru/teleclass/glava3/gl-3-1.shtml>
6. <http://www.ostu.ru/personal/sim/Concept/DAT/planlex.html>
7. http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):

9.1. Перечень помещений, необходимых для проведения аудиторных занятий по дисциплине.

1. аудитория лекционная с мультимедийными средствами для презентации лекционного материала;
2. учебная лаборатория с необходимым оборудованием, химической посудой и реактивами, с наглядными пособиями в виде таблиц для проведения лабораторных занятий;
3. комплект учебно-методической литературы и справочной литературы для обеспечения самостоятельной работы студентов.

9.2. Перечень оборудования, необходимого для проведения аудиторных занятий по дисциплине.

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий	Перечень оборудования и технических средств обучения
1	Лекционные аудитории	переносной экран, проектор, ноутбук
2	Компьютерные классы	Компьютерное оборудование с программным обеспечением GAUSSIAN, HYPERCHEM, и др.
	Лаборатории	спектрофотометры «СФ-28», рефрактометры Аббе, весы аналитические. При проведении лабораторных работ используются химические реактивы и посуда.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

Рабочая программа составлена с учетом Федерального Государственного образовательного стандарта профессионального образования по направлению подготовки – **по специальности 04.05.01. – "Фундаментальная и прикладная химия"**, утвержденного **приказом № 1174 от 12.09.2016г Министерством образования и науки РФ.**

11. Технологическая карта дисциплины

Курс IV группа 406 семестр 7

Преподаватель – лектор профессор, д.х.н. А.И. Дикусар

Преподаватель, ведущие практические занятия профессор, д.х.н. А.И. Дикусар

Кафедра химии и МПХ естественно-географического факультета

ПГУ им. Т.Г. Шевченко.

Семестр	Количество часов						Форма итогового контроля
	Трудо- емкость, з.е./часы	В том числе					
		Аудиторных				Самост. работы	
		Всего	Лекций	Лаб. раб.	Практич. занятия		
6	3/108	40	20	28		24	Экзамен
Итого:	3/108	40	20	28		24	36

В соответствии с рекомендованной типовой программой модули внутри дисциплины не запланированы. **Модульно-рейтинговая система не используется.** Студентам на практическом и лабораторном занятии выдаются методические материалы, контрольные вопросы и домашние задания по теме следующего практического занятия, рекомендуются источники для самостоятельного изучения, а на следующем занятии осуществляется закрепление полученных знаний, решение конкретных исследовательских задач, разъяснение не полностью усвоенного материала.

Дополнительные требования для студентов, отсутствующих на занятиях по уважительной причине: устное собеседование с преподавателем по проблемам пропущенных практических занятий, обязательное выполнение внеаудиторных контрольных и письменных работ.

Составитель



профессор, д.х.н. А.И. Дикусар

Зав. кафедрой химии и МПХ



доцент, к.х.н. Т.В.Щука