

Наименование дисциплины	ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
Интерактивные формы обучения	Интерактивные лекции, семинары, дискуссии, доклады, рефераты и др.
Цели освоения дисциплины	
Изучение теоретических и практических основ физико-химических методов анализа состава, структуры и свойств веществ, основных экспериментальных закономерностей, лежащих в основе физико-химических методов исследования, их связи с современными технологиями. Формирование у студентов компетенций в области основных физико-химических методов установления состава и строения неорганических и органических соединений, формирование навыков к самостоятельной работе с современным научно-исследовательским оборудованием для физико-химического анализа веществ, умением интерпретировать получаемые результаты и работать с аналитическими базами данных физико-химических свойств веществ.	
Место дисциплины в структуре ООП	
Дисциплина “Физические методы исследования” входит в вариативную часть дисциплин и основывается на знаниях, навыках и умениях, приобретенных в результате освоения программ высшего образования по математике, информатике, физике, технологии лабораторного эксперимента, неорганической, органической, физической и аналитической химии в высшей школе. Успешному освоению дисциплины сопутствует параллельное изучение курсов «строение вещества», «кристаллохимия», «координационная химия». Данная учебная дисциплина включена в раздел Б1.В.ОД.10 основной образовательной программы 04.03.01 «Химия» и относится к вариативным дисциплинам.	
Основное содержание	
<p>Модуль 1 «Общая характеристика физических методов исследования веществ» (1.1. Общая характеристика и классификация методов. Прямая и обратная задачи метода. Некорректность постановки обратных задач. Общая характеристика и классификация методов исследования строения молекул и кристаллов. Методы химические и физические. Методика постановки исследовательской задачи. 1.2. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные, термодинамические методы. Методы спектральные и не спектральные. Не спектральные методы исследования: дифракционные методы (рентгеноструктурный анализ, электронография, нейтронография), масс-спектрометрия, электрические и магнитные методы. Спектроскопические методы. Главный критерий отнесения физического метода анализа к спектральному - взаимодействие электромагнитного излучения с веществом, приводящее к различным энергетическим переходам, регистрируемым экспериментально. Природа электромагнитного излучения. Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Различные типы взаимодействия излучения с веществом. Спектры испускания, поглощения и рассеяния атомов, ионов, молекул и кристаллов. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих соответствующую спектральную область. Классификация спектральных методов по длинам волн (-резонанс, рентгеновская, УФ, видимая, ИК, микроволновая, радиоспектроскопия), по природе переходов (ядерные, электронные, колебательные, вращательные спектры, ЯМР, ЭПР, ЯКР), по типу взаимодействия (спектры поглощения, испускания, рассеяния). 1.3. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов. Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов. 1.4. Оборудование. Обзор современного научного оборудования, компаний производителей и областей использования).</p> <p>Модуль 2 «Дифракционные и спектроскопические методы» (2.1. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Плотность состояний электромагнитного поля. Квантование энергии электромагнитного поля. Формула Планка. Коэффициенты Эйнштейна и вероятности переходов. Равновесное и неравновесное распределение частиц по энергиям, отрицательная температура. Обзор методов. 2.2. Методы колебательной ИК и КР спектроскопии. Описание колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные,</p>	

обертонные и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Техника и методики ИК спектроскопии. Аппаратура ИК спектроскопии, приготовление образцов. 2.3. Методы электронной УФ и видимой 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. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем в электронных спектрах поглощения. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый выход люминесценции). Закономерности люминесценции. Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа. 2.4. Методы рентгеновской и фотоэлектронной спектроскопии. Физические основы методов и экспериментальная техника. Общие принципы. Параметры и структура фотоэлектронных спектров: химический сдвиг, спин-орбитальная связь в молекулах и некоторые другие эффекты. Колебательная структура фотоэлектронных спектров. Интенсивность фотоэлектронных пиков. Глубина выхода фотоэлектронов. Элементный анализ и идентификация соединений. Техника и методика эксперимента. Аппаратура. 2.5. Методы магнитного резонанса. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР первого и не первого порядков. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР. Характер образцов. 2.6. Хромато-масс спектрометрия. Основы масс-спектрометрии. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электростатическое неоднородное поле, химическая ионизация. Комбинированные методы. 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. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Хромато-масс спектрометрия как один из мощнейших инструментов для идентификации сложных органических смесей.).

Модуль 3 «Термохимические методы исследования» (3.1. Основы термохимии. Основные законы термохимии. Термохимические расчеты при стандартной температуре. Понятие теплоёмкости и расчет тепловых эффектов химических процессов при различных температурах. Обзор методов. Условия применимости метода. 3.2. Термогравиметрия. Основы метода. Процессы, протекающие с изменением массы. Изотермическая, квазистатическая и динамическая термогравиметрия. Математическая обработка экспериментальных данных. Уравнения Кнудсена и Клаузиуса – Клапейрона. Методика подбора условий эксперимента. Оборудование. 3.3. Калориметрия. Общие сведения о калориметрии. Классификация и устройство калориметров. Градуировка калориметра. Проведение и расчет опыта в калориметре с переменной температурой. Единицы измерения теплоты.).

Формируемые компетенции

- способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1)
- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1).

• владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2).
Образовательные результаты
Знания: основы теории и практики использования важнейших физических методов для решения химических проблем; принципы устройства (блок-схему) любого физического прибора;
Умения: правильно выбрать метод или группу методов для решения той или иной химической задачи;
Владение: навыками анализа тонкой структуры соединений, динамики внутри- и межмолекулярных превращений на основе данных соответствующих методов; использовать свои знания на практике
Взаимосвязь дисциплины с профессиональной деятельностью выпускника
Освоение дисциплины обеспечивает решение выпускником задач будущей профессиональной деятельности (научно-исследовательской, производственно-технологической), связанной с использованием знаний о физических методах исследования для решения химических задач по своей научно-исследовательской работе.
Ответственная кафедра
Кафедра неорганической химии

Начальник УМУ _____



Н.Е. Гордина