

Приложение 6
УТВЕРЖДЕНО
приказом ФИЦ КазНЦ РАН
01.03.2019 № 7-А

Разработано и рекомендовано к утверждению
Ученым советом ИОФХ им. А.Е. Арбузова -
обособленного структурного подразделения
ФИЦ КазНЦ РАН
«27» февраля 2019 г., протокол № 3

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Современные методы исследования состава, структуры и свойств
веществ и материалов»**

Уровень высшего образования
Подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки

04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность подготовки:

Органическая химия (02.00.03)

Физическая химия (02.00.04)

Высокомолекулярные соединения (02.00.06)

Химия элементоорганических соединений (02.00.08)

Нефтехимия (02.00.13)

Квалификация выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

СОДЕРЖАНИЕ

1. Виды учебной деятельности, способ и формы ее проведения, трудоемкость дисциплины.
2. Перечень планируемых результатов обучения.
3. Место дисциплины в структуре образовательной программы.
4. Содержание дисциплины.
5. Учебно-тематический план занятий
6. Формы текущего и итогового контроля, критерии оценки.
7. Перечень учебной литературы и ресурсов сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины.
8. Описание материально-технической базы, необходимой для освоения дисциплины.

1. ВИДЫ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, СПОСОБ И ФОРМЫ ЕЕ ПРОВЕДЕНИЯ, ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Виды учебной деятельности: аудиторные занятия - 1 зачетная единицы труда (36 часов), самостоятельная работа – 4 зачетных единиц труда (144 часа), всего – 5 зачетных единиц труда (180 часов).

Форма проведения аудиторных занятий – лекции и консультации.

В рамках часов самостоятельной работы по указанию преподавателя аспиранты прорабатывают темы и осваивают теоретические вопросы, излагаемые в лекционном курсе, а также самостоятельно изучают другие вопросы программы.

Формой итогового контроля является зачет.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

В результате освоения дисциплины выпускник должен обладать следующими компетенциями:

2.1 Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4).

3.2 Обще-профессиональные компетенции:

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

3.3 Профессиональные компетенции для профиля Органическая химия (02.00.03):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной органической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной органической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3);

- способность к установлению структуры и исследованию реакционной способности органических соединений (ПК-4);
- готовность к направленному синтезу соединений с полезными свойствами или новыми структурами (ПК-5).

3.4 Профессиональные компетенции для профиля Физическая химия (02.00.04):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной физической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной физической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3)
- способность к выявлению и установлению закономерностей, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами (ПК-4).

3.5 Профессиональные компетенции для профиля Высокомолекулярные соединения (02.00.06):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной химии высокомолекулярных соединений и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной химии высокомолекулярных соединений(ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3)
- способность к синтезу олигомеров, полимеров и сополимеров, целенаправленному регулированию строения и модификации функций высокомолекулярных соединений физическими и химическими методами; выявлению и установлению закономерностей динамики старения полимеров и композитов, методов стабилизации их свойств в условиях внешних воздействий (ПК-4).

3.6 Профессиональные компетенции для профиля Химия элементоорганических соединений (02.00.08):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной химии элементоорганических соединений и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной химии элементоорганических соединений (ПК-2);

- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3)
- способность к направленному синтезу соединений с практически важными свойствами или новыми структурами; выявлению и установлению закономерностей строения, физико-химических свойств и реакционной способности элементоорганических соединений (ПК-4).

3.7 Профессиональные компетенции для профиля Нефтехимия (02.00.13):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной нефтехимии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной нефтехимии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3);
- способность к изучению нефти как природного объекта и важнейшего источника химического сырья; изучению и разработке процессов превращения нефти в химические продукты (ПК-4).

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Современные методы исследования состава, структуры и свойств веществ и материалов» является дисциплиной по выбору и включена в Блок № 1 программы аспирантуры, относящийся к вариативной части основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки. Обучение проводится на втором курсе.

Данная дисциплина базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов «Строение вещества», «Физические методы исследования» в рамках магистерской программы образования или специалитета. Владением данными знаниями и умениями устанавливается в ходе вступительных испытаний в аспирантуру.

Аспирант должен обладать навыками самостоятельного освоения изучаемого материала.

В результате освоения дисциплины аспирант должен получить дополнительные знания, умения и навыки. Аспирант должен:

Знать:

- современные теории строения вещества;
- базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования состава, структуры и свойств веществ.

Владеть:

- навыками обработками и интерпретации экспериментальных и спектральных данных для получения структурных и энергетических параметров молекул

Уметь:

- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью спектральных, дифракционных и резонансных методов.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Основы масс-спектрометрии органических соединений

Общие принципы и термины масс-спектрометрии. Области применения.

Методы ионизации для анализа термически стабильных низкомолекулярных, до 1000 а.е.м., органических соединений. Ионизация электронами. Принципиальная схема источника ионов с ионизацией электронами, масс-спектры ЭИ, газовая хромато-масс-спектрометрия, библиотеки масс-спектров NIST и WILEY.

Химическая ионизация. Преимущества и ограничения методов ионизации.

Методы ионизации для анализа термически нестабильных и высокомолекулярных органических соединений.

Ионизация электрораспылением. Механизм ионизации электрораспылением, особенности «наноспрея», принципиальная схема источника ионов с электрораспылением. Химическая ионизация при атмосферном давлении. Механизм ионизации. Принципиальная схема источника ионов с химической ионизацией при атмосферном давлении. Жидкостная хромато-масс-спектрометрия. Лазерная десорбция/ионизация при помощи матрицы: механизм ионизации при лазерной десорбции, роль и виды матриц, принципиальная схема источника ионов с матрично-активированной лазерной десорбцией/ионизацией. Преимущества и ограничения методов ионизации.

Методы разделения ионов в масс-спектрометрии. Ключевые параметры масс-анализаторов - разрешающая способность, скорость сканирования, диапазон измеряемых масс ионов. Магнитный секторный масс-анализатор. Квадрупольный масс-анализатор. Трехмерная ионная ловушка. Времяпролетный масс-анализатор. Масс-анализатор с ионно-циклотронным резонансом и преобразованием Фурье. Тандемная масс-спектрометрия. Преимущества и ограничения масс-анализаторов.

4.2. Спектроскопические методы исследования

Основные критерии объединения разнообразных физических методов анализа в единый класс спектроскопических методов. Главный критерий отнесения физического метода анализа к спектроскопическому – взаимодействие электромагнитного излучения с веществом, приводящее к различным

энергетическим переходам, регистрируемым экспериментально.

Природа электромагнитного излучения, различные типы его взаимодействия с веществом (периодические изменения электрических и магнитных дипольных моментов). Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число).

Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих соответствующую спектральную область.

Спектры испускания, поглощения и рассеяния атомов, ионов и молекул. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина).

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.

Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные координаты. Коэффициенты кинематического взаимодействия. Силовые постоянные.

Учет симметрии молекулы. Симметрия нормальных колебаний, координаты симметрии. Анализ нормальных колебаний молекулы по экспериментальным данным. 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.

Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Исследования динамической изомерии, равновесия, кинетики реакций.

Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, прозрачные материалы, приготовление образцов. Аппаратура спектроскопии КР, преимущества лазерных источников возбуждения.

Эмиссионная Уф спектроскопия как метод исследования двухатомных молекул. Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Принцип Франка – Кондона. 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. 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 и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции). Закономерности люминесценции (закон Стокса – Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции.

Практическое использование количественного люминесцентного анализа.

4.3. Дифракционные методы

Природа рентгеновского излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Основы дифракционных методов исследования. Геометрическая интерпретация условий дифракции. Уравнение Вульфа-Брэггов. Уравнения Лауэ и их геометрический смысл. Обратная решетка, взаимосвязь параметров прямой и обратной решетки. Сфера отражения. Основные положения кинематического приближения теории рассеяния, атомная амплитуда и ее вычисление. Рассеяние элементарной ячейкой кристалла. Структурная амплитуда. Симметрия дифракционной картины. Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновской дифракции. Преобразование Фурье и представление электронной плотности рядом Фурье.

Основные представления кристаллохимии. Идеальные кристаллы: периодичность, элементарная ячейка. Примитивные и непримитивные элементарные ячейки, узел ячейки. Симметрия элементарной ячейки: сингонии, точечные и пространственные группы симметрии. Ячейки Бравэ. Индексы узлов, направлений и плоскостей в кристаллах (индексы Миллера). Особенности строения кристаллов низкомолекулярных органических соединений, полимеров и биоорганических соединений. Наиболее распространенные пространственные группы органических кристаллов. Специфические межмолекулярные контакты в органических кристаллах.

Основные задачи исследования кристаллов с помощью дифракционных методов. Источники излучения, их достоинства и недостатки. Способы получения дифракционной картины. Дифракционные методы исследования структуры вещества. Сравнительные характеристики рентгеновского, электронографического и нейтронографического методов исследования. Их возможности, достоинства и недостатки. Требования к образцам.

Рентгеноструктурный анализ, его основные этапы. Схема и общие принципы

работы 4-х кружных дифрактометров. Проблема начальных фаз в рентгеноструктурном анализе. Прямые методы решения структур кристаллов. Общая схема основных этапов. Определение параметров ячейки, число формульных единиц в элементарной ячейке. Независимая часть элементарной ячейки: координаты атомов и параметры их атомных смещений. Систематические погасания рефлексов. Критерии правильности определения структуры по дифракционным данным. R – фактор. Влияние температуры на рентгенодифракционную картину. Банки кристаллографических данных, их использование. Прецизионный рентгеноструктурный анализ. Топологический анализ электронной плотности (по Бейдеру).

Рентгенография кристаллических образований. Дифракция на кристаллах малых размеров. Метод порошка. Ширина и профиль интерференционных линий от поликристаллического порошка. Формула Селякова-Шеррера. Полнопрофильный анализ. Метод Ритвельда. Качественный рентгенофазовый анализ. Способы количественного рентгенофазового анализа. Корундовое число. Содержание и использование банка ICDD – базы PDF. Рентгенография газов, жидкостей, аморфных тел. Общая теория рассеяния на произвольных телах. Уравнение Дебая. Радиальная функция межатомных расстояний. Основные положения динамического приближения теории рассеяния.

Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей как метод определения размеров кристаллитов и пор в наноматериалах. Основы теории малоуглового рассеяния. Приближение Гинье. Геометрические и весовые инварианты. Возможности метода: минимальный размер частиц. Нейтронографические методы исследования. Малоугловое рассеяние нейтронов на неупорядоченных системах. Рентгеновская рефлектометрия. Определение толщины и количества слоев в многослойных материалах.

4.4. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения

Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона – аномальная дисперсия. Схема эксперимента. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ. Правило октантов.

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 Фриделя. Рассеяние рентгеновских лучей с длиной волны, близкой к поглощению, – аномальное рассеяние. Определение абсолютной конфигурации молекул.

4.5. Магнетохимические и электрооптические методы исследования

Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная 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. Квантовомеханический подход к описанию парамагнитного поведения системы с $s=1/2$. Законы Кюри и Кюри-Вейса. Микроскопическая природа магнетизма. Магнитный момент парамагнитных систем с $s > 1/2$. Орбитальный магнитный момент и спин-орбитальное взаимодействие. Магнитные свойства неорганических соединений и комплексов переходных металлов. Особенности магнитных свойств полиядерных комплексов.

Релеевское рассеяние света. Деполяризация при рассеянии на анизотропных молекулах. Анизотропия поляризуемости, коэффициенты деполяризации. Схема эксперимента. Закон Керра. Связь молярной постоянной Керра с главными значениями поляризуемости молекул. Схема эксперимента. 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. Уравнение для вращения плоскости поляризации света в магнитном поле. Константа Верде. Схема эксперимента. Использование многоходовых кювет. Понятие о магнитооптической вращательной дисперсии и магнитном круговом дихроизме. Применение в органической химии и химии комплексных соединений (анализ проблем сопряжения, ароматичности, конформации, отнесение электронных переходов).

4.6. Резонансные методы

Метод ЯМР. 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. Метод двойного резонанса.

Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров. Характер образцов.

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. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Использование спиновых меток. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности эксперимента, достоинства и ограничения метода.

Метод ЯКР. Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем. Градиент поля на ядре. Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля. Параметр асимметрии поля и уровни энергии. Приложения метода ЯКР и его возможности.

5. УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Наименование темы	Аудиторные занятия	Самост. работа	Всего часов
4.1.	Основы масс-спектрометрии органических соединений	9	15	24
4.2.	Спектроскопические методы исследования	9	33	42
4.3.	Дифракционные методы	9	33	42
4.4.	Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения		15	15
4.5.	Магнетохимические и электрооптические методы исследования		15	15
4.6.	Резонансные методы	9	33	42
	ИТОГО	36	144	180

6. ФОРМЫ ТЕКУЩЕГО И ИТОГОВОГО КОНТРОЛЯ, КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ

Текущий контроль освоения дисциплины проводится регулярно, начиная со второй недели обучения, в форме контроля посещаемости, устного опроса по изучаемой теме. Формой итогового контроля по дисциплине является зачет. Зачет

проводится по ситуационным задачам на идентификацию структуры вещества различными физическими методами (пример задач в Приложении).

Критерии оценки итогового контроля:

«зачтено»	Задача решена – структура идентифицирована полностью или частично, - показаны возможности использования различных физических методов, продемонстрировано знание теоретических основ примененных методов
«не зачтено»	Задача не решена – структура не идентифицирована, у обучающегося возникают трудности при использовании физических методов, продемонстрированы недостаточно глубокие знания теоретических основ изучаемых методов

При отсутствии оценки «зачтено» обучающийся не допускается к промежуточной аттестации

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

7.1. Литература

1. Glusker J.P., Trueblood K.N. Crystal Structure Analysis: A Primer. Oxford University Press, 2010.
2. Guinier A. and Fournet G. Small-Angle Scattering of X-Rays. – New York: John Wiley & Sons, Inc.; London: Charman & Hall, Ltd., 1955. 268 p.
3. Neuhaus, D. The Nuclear Overhauser Effect in Structural and Conformational Analysis / D. Neuhaus, M.P. Williamson. – 2nd ed. – Wiley-VCH, 2000. – 619 p.
4. O. David Sparkman, J. Throck Watson. Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation. NY., John Wiley
5. Ooi, Li-ling Principles of X-ray crystallography / Li-ling Ooi. – Oxford: Oxford University Press, 2010. – 154 p.
6. Robert E. Dinnebier, Simon J.L. Billinge. Powder Diffraction: Theory and Practice. RSC Publishing, 2008
7. Асланов Л.А., Треушников Е.Н. Основы теории дифракции рентгеновских лучей – М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1985.
8. Блюмих, Б. Основы ЯМР. Для ученых и инженеров / Б. Блюмих; под ред. В.П. Ананикова; пер. с англ. – М.: Техносфера, 2011. – 256 с.: ил. – (Мир физики и техники). (+1 экз. издание 2007 г.)
9. Бузник В.М. Ядерный резонанс в ионных кристаллах. - Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1981. - 225 с.

10. Булгаков, Р.Г. и др. Хемилюминесценция металлоорганических соединений. - М.: Наука, 1989. - 220 с.
11. Вонсовский. С.В. Магнетизм. Магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферримагнетиков. - М.: Наука, 1971. - 1032 с.
12. Габуда С.П., Козлова С.Г. Неподеленные электронные пары и химическая связь в молекулярных и ионных кристаллах: мультядерная ЯМР-спектроскопия, магнетохимия, электронные корреляционные взаимодействия и релятивистские эффекты. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2009. – 164 с.
13. Гинье А. Рентгенография кристаллов. –М.: Гос. изд-во физ.-мат. Лит., 1961. 604с.
14. Гольдман, М. Спиновая температура и ЯМР в твердых телах. - М.: Мир, 1972. - 342 с.
15. Грассели, Дж. и др. Применение спектроскопии КР в химии. – М.: Мир, 1984. - 216 с.
16. Драго Р. Физические методы в химии: В 2 т. М.: Мир, 1981. Т. 1, 2.
17. Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Простаков Н.С. Основы масс-спектрометрии органических соединений. М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2001 г. – 286 с.
18. Зарипов, М.М. Основы теории спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах: Курс лекций / М.М. Зарипов; Казанский гос. ун-т. – Казань: Казан. гос. ун-т, 2009. – 208 с.: ил.
19. Илиел Э. и др. Основы органической стереохимии / пер. с англ. Бредихин А.А и др. - М.: БИНОМ, 2007. - 703 с.
20. Коптев Г.С. Расчет колебаний молекул. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1977. - 208 с.
21. Краббе П. Применение хироптических методов в химии. – М.: «Мир», 1974. – 168 с.
22. Кузяков Ю.Я., Семенов К.А., Зоров Н.Б. Методы спектрального анализа. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.-213 с.
23. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М., «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2003 г. – 493 с.
24. Лундин А.Г. ЯМР-спектроскопия – М.: Наука, 1986. – 223 с.
25. Наберухин Ю.И. Лекции по молекулярной спектроскопии: Спец-курс для студентов-физиков НГУ. - Новосибирск, 1973. - 293 с.
26. Пентин Ю.А., Вилков Н.В. Физические методы исследования в химии – М.: Мир, 2012. – 683 с. (+ 1 экз. издание 2009 г.; + 1 экз. издание 2003 г.)
27. Порай–Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высшая школа, 1989. – 192 с.
28. Пуле А., Матье Ж.-П. Колебательные спектры и симметрия кристаллов / пер. под ред Г.Н. Жижина – М.: Мир, 1973-437с.
29. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. - Л.: Химия, 1985. - 248 с. (+ 1 экз. 1974 г.)

30. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений: пер. с англ. / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 557 с. (2 экз. + 1 экз. издание 1977 г.).
31. Соложенкин, П.М. Электронный парамагнитный резонанс в анализе веществ / Душанбе: Дониш, 1986. - 291 с.
32. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: учеб. для вузов / Ю.М. Воловенко и др. – М.: МБФНП, 2011. – 694 с.: ил.
33. Фаррар Т.С. и др. Импульсная и Фурье-спектроскопия ЯМР – М.: Мир, 1973. - 166 с.
34. Финч А., Гейтс П. И др. Применение длинноволновой ИК спектроскопии в химии. - М.: Мир, 1973. - 284 с.
35. Фримэн, Р. Магнитный резонанс в химии и медицине: пер. с англ. / Р. Фримэн. – М.: КРАСАНД, 2009. – 336 с.
36. Харгиттай И., Харгиттай М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989. – 494 с.
37. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. - М.: Техносфера, 2007. - 368 с. (2 экз.)
38. Юрченко Э.Н. Методы молекулярной спектроскопии в химии координационных соединений и катализаторов. - Новосибирск: Наука, сибирское отделение, 1986. - 254 с.
39. *Bader R.F.W. Atoms In molecules. A Quantum Theory.* – Oxford: Clarendon Press, 1990.

7.2. Электронные ресурсы

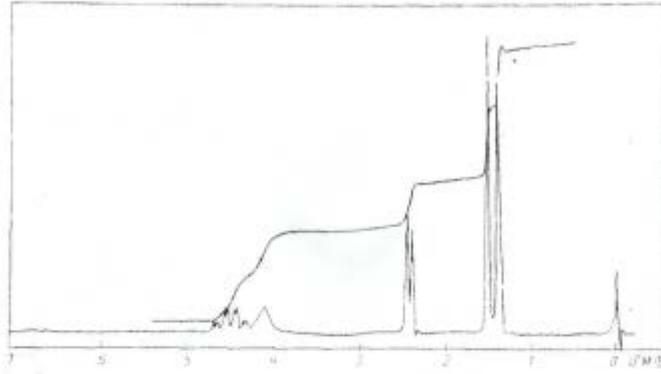
- ✓ Электронная платформа издательства American Chemical Society - <http://www.pubs.acs.org>
- ✓ Электронная платформа издательства Taylor&Francis - <http://www.informaworld.com>
- ✓ Электронная платформа издательства - [http:// www.scitation.aip.org](http://www.scitation.aip.org)
- ✓ Электронная платформа издательства Royal Society of Chemistry - <http://www.rsc.org>
- ✓ Электронная платформа издательства WILEY-BLACWALL - <http://www.interscience.wiley.com>
- ✓ Электронная платформа издательства SPRINGER - <http://www.springerlink.com>
- ✓ Платформа научной электронной библиотеки e-Library.ru - <http://www.elibrary.ru>
- ✓ Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.sciencedirect.com>
- ✓ Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.scopus.com>
(Реферативно-поисковая база данных Scopus)

8. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные занятия и консультации, самостоятельная работа по освоению дисциплины и подготовка к сдаче кандидатских экзаменов проводятся в специальных помещениях (читальный зал научной библиотеки и/или конференц-залы), оборудованных мебелью (столы, стулья), классной доской (меловой), компьютером, проектором для демонстрации презентаций.

Приложение

Задача 1. Соединение C_4H_6O имеет ПМР-спектр, приведенный на рис. 1. В ИК-спектре этого соединения в CCl_4 , наблюдаются полосы поглощения 2140, 3300 и 3610 см^{-1} . Определите структуру соединения.



Задача 2. Соединение $C_8H_{11}NO$ имеет в ИК-спектре полосы поглощения 3490 и 3400 см^{-1} . ПМР спектр приведен на рис. 2. Определите структуру соединения.

