

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением Ученого совета ННГУ
протокол № 13 от 30.11.2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Физические методы исследования

Уровень высшего образования
Специалитет

Направление подготовки / специальность
04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы
Неорганическая химия

Форма обучения
очная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.03.10 Физические методы исследования относится к обязательной части образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности. ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.	ОПК-3.1: Владеть навыками построения теоретических и эмпирических моделей при решении задач химической направленности. Уметь применять математические модели для обработки результатов изучения свойств процессов. Знать современные подходы к обработке результатов эксперимента ОПК-3.2: Владеть навыками работы с программным обеспечением современных аналитических приборов ведущих мировых производителей. Уметь получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современного программного обеспечения. Знать современные подходы к статистической обработке результатов эксперимента и их стандартизированному представлению.	Контрольная работа	Экзамен: Задачи Контрольные вопросы

<p>ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</p>	<p>ОПК-4.1: Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.</p> <p>ОПК-4.2: Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.</p> <p>ОПК-4.3: Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.</p>	<p>ОПК-4.1:</p> <p>Владеть методиками анализа веществ с использованием современного аналитического оборудования в рамках методов ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса, колебательной, микроволновой и электронной спектроскопии, рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии. Уметь выбирать метод исследования для получения необходимой информации при характеристизации веществ.</p> <p>Знать основные законы физики и химии, необходимые для корректной постановки и проведения эксперимента по изучению свойств химических соединений с помощью инструментальных методов.</p> <p>ОПК-4.2:</p> <p>Владеть навыками обработки данных с последующей интерпретацией полученных результатов. Уметь исследовать числовые характеристики и качественные свойства объекта при помощи аппроксимации. Знать фундаментальные основы математики и физики для решения задач.</p> <p>ОПК-4.3:</p> <p>Владеть физическими основами методов исследования для интерпретации полученных в результате химического эксперимента данных. Уметь применять знания в области физики, математики и химии для описания наблюдаемых явлений. Знать рамки применимости теоретических знаний и практических навыков для решения тех или иных исследовательских</p>	<p>Контрольная работа</p>	<p>Экзамен: Задачи Контрольные вопросы</p>
---	---	---	---------------------------	--

		задач.		
ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля.	ОПК-5.1: Владеть навыками работы с базами данных при изучении химических веществ. Уметь осуществлять корректный поиск требуемой информации при интерпретации полученных результатов экспериментов. Знать основные основных требования информационной безопасности при сборе, анализе, обработке и представлении информации.	Контрольная работа	Экзамен: Задачи Контрольные вопросы

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	5
Часов по учебному плану	180
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	64
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	64
- КСР	2
самостоятельная работа	14
Промежуточная аттестация	36
	экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего	в том числе
---	-------	-------------

	(часы)	Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
Тема 1. Общая характеристика и классификация методов исследования	5	4	0	4	1
Тема 2. Метод ядерного магнитного резонанса	15	6	8	14	1
Тема 3. Метод электронного парамагнитного резонанса	15	6	8	14	1
Тема 4. Методы квадрупольного и гамма - резонанса ядер	16	6	8	14	2
Тема 5. Микроволновая спектроскопия	15	6	8	14	1
Тема 6. Колебательная спектроскопия	15	6	8	14	1
Тема 7. Методы электронной УФ-спектроскопии	13	4	8	12	1
Тема 8. Дифракционные методы	15	6	8	14	1
Тема 9. Методы масс-спектрометрии	13	4	8	12	1
Тема 10. Методы рентгеновской и фотоэлектронной (ФЭС) спектроскопии	5	4	0	4	1
Тема 11. Методы исследования оптически активных веществ	5	4	0	4	1
Тема 12. Термические методы исследования	5	4	0	4	1
Тема 13. Методы микроскопии	5	4	0	4	1
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	180	64	64	130	14

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Физические методы исследования" (<https://e-learning.unn.ru/course/view?id=3508>).

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольная работа) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

Для **p**-радикалов соотношение Мак-Коннела используют при расчете электронной плотности неспаренного электрона на атомах углерода по данным ЭПР. Используя этот принцип, рассчитайте спиновую плотность на атомах углерода в ион-радикале C_5H_5N , для которого приведены константы СТВ в мТ (примите константу Мак-Коннела $Q = 2.4$ мТ). Приведите ожидаемое значение спиновой плотности на атоме азота и предполагаемое значение константы СТВ.

Волновые числа первых трех линий вращательного спектра окиси углерода $^{12}C^{16}O$ равны 3.85; 7.69 и 11.53 cm^{-1} . Определите вращательную постоянную B_0 (в cm^{-1}), момент инерции I_0 и межъядерное расстояние r_0 (в Å) с точностью до двух значащих цифр. $c = 3 \cdot 10^8$ м/с; $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; 1 а.е.м. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ кг.

Определите структуру соединения $I_2Br_2Cl_4$, если известно, что а) молекула I_2Cl_6 плоская и имеет МБ-спектр, содержащий один мультиплет с величиной ХС равной 3,50 мм/с, б) рассматриваемая молекула также плоская, но имеет спектр, содержащий два мультиплета с ХС 2,82 и 3,48 мм/с. Изобразите на бумаге все возможные структуры плоской молекулы $I_2Br_2Cl_4$ и методом исключения, основываясь на сравнении ХС спектров двух приведенных молекул, выберите искомую структуру.

Приведите общий вид спектров и соотношения интегральных интенсивностей в них для трех изомеров дихлорпропана $C_3H_6Cl_2$.

Соль марганца Mn^{+2} , нанесенную на инертный носитель, часто используют в качестве стандартного образца при калибровке ЭПР-спектрометров. Как выглядит спектр $MnCl_2$, нанесенного на порошок известняка. Объясните причину появления сигнала ЭПР исходя из электронного строения компонентов образца ($MnCl_2 + CaCO_3$) и его вид. Спин ядра $I(Mn) = 5/2$.

Для ряда непредельных кислот $CH_3(CH=CH)_nCOOH$, где $n = 2, 3, 4$, в УФ-спектрах имеются максимумы поглощения при 260 нм ($\epsilon = 6500$), 310 нм ($\epsilon = 9000$) и 330 нм ($\epsilon = 11000$). Соотнесите данные спектров с формулами кислот.

Изобразите структуру ядерных энергетических уровней и качественный вид спектра ЯГР ^{129}I при наличии квадрупольного расщепления ($7/2 \otimes 5/2$).

В ИК-спектре поглощения молекулы $D^{37}Cl$ наблюдается ряд колебательно-вращательных полос поглощения, интенсивность которых резко падает с возрастанием их волновых чисел. Центры полос находятся при 2091.0; 4128.6 и 6112.8 cm^{-1} . Проведите отнесение колебательных полос к соответствующим колебательным переходам Dv и определите частоту колебания ω_e , постоянную ангармоничности $\omega_e x_e$ и силовую постоянную k_e молекулы $D^{37}Cl$. $c = 3 \cdot 10^8$ м/с; $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; 1 а.е.м. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ кг.

Изобразите спектр радикала $CH_2\bullet OH$, если расстояние между пиками в дублете равно 0.12 мТ, а между центрами дублетов — 1.8 мТ.

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольная работа) для оценки сформированности компетенции ОПК-4

Методы квадрупольного и гамма - резонанса ядер

Принципы метода ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР).

Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля.

Параметр асимметрии поля и уровни энергии.

Интенсивность, ширина, частота и мультиплетность переходов в ЯКР.

Зеемановское расщепление в ЯКР.

Приложение метода ЯКР в химии и его возможности.

Незаконченность теории, особенность эксперимента. Примеры.

Эффект Мессбауэра и условия его наблюдения.

Влияние химического окружения ядер на эффект Мессбауэра.

Квадрупольное расщепление для высоко- и низкоспиновых комплексов железа.

Магнитные взаимодействия в гамма-резонансной ядерной флуоресценции.

Возможности применения эффекта Мессбауэра в химии и его ограничения.

Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем.

Определение дипольного момента в газах (первый метод Дебая) и растворах (второй метод Дебая).

Применение данных по дипольным моментам молекул для определения их симметрии и конформации.

Вращательные состояния двухатомной молекулы согласно квантовой механике в приближении жесткого и нежесткого (колеблющегося) ротатора.

Системы вращательных уровней энергии и их заселенность. Функция распределения.

Методы наблюдения вращательных спектров.

Основные характеристики и способы выражения спектра электромагнитного излучения. Матричный элемент дипольного момента перехода. Правила отбора. Интенсивность линий в спектрах.

Определение геометрических параметров молекул из вращательных спектров.

Вращательные спектры многоатомных молекул.

Схемы радиоспектрометров.

5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Контрольная работа) для оценки сформированности компетенции ОПК-5

1. Принципы работы кристаллографической базы данных FindIt

2. Принципы работы программного обеспечения для обработки колебательных спектров поглощения/пропускания IR Solution

3. Принципы работы программного обеспечения для уточнения кристаллической структуры по методу Ритвельда Торас

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольная работа)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продемонстрированы основные умения. При решении типовых заданий могут быть негрубые ошибки. Имеется набор навыков выше минимального для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
не зачтено	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достиж	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				

ения компет енций)							
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельным и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».

	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации

5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

Оценочное средство - Задачи

Экзамен

Критерии оценивания (Задачи - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

Типовые задания (Задачи - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-3 (Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и

процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения)

Во вращательном КР-спектре водорода наблюдаются линии со следующими смещениями σ относительно возбуждающей линии: 354.38; 587.06; 814.41 и 1034.65 см⁻¹. Рассчитайте вращательную постоянную B_0 , момент инерции I_0 и межъядерное расстояние r_0 , пренебрегая эффектом центробежного растяжения. $c = 3 \cdot 10^8$ м/с; $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; 1 а.е.м. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ кг.

Степень поглощающей способности вещества в ЭСП отражает коэффициент экстинкции $\epsilon = f(\sigma)\sigma$, интегральная интенсивность $J = \epsilon d\sigma$ и сила осциллятора f , которая характеризует вероятность электронного перехода ($f = \epsilon \sigma d\sigma$) и изменяется для разрешенных переходов в интервале 1–0.01. Существует также приближенное соотношение $\epsilon = 4.6 \cdot 10^{-9} \sigma_{\max} \sigma_{1/2}$, где $\sigma_{1/2}$ — полуширина линии, т.е. ширина на половине высоты пика. Определите диапазон значений коэффициента экстинкции для разрешенных переходов, если принять что $\sigma_{1/2} = 5000$ см⁻¹ (эта величина характерна для растворов многих молекулярных веществ).

Рассчитайте величины межплоскостных расстояний d и углов 2θ для 111 и 200 отражений, полученных на порошковой рентгенограмме кубического кристалла с параметром $a = 5.0$ Å при съемке на $\text{CuK}\alpha$ -излучении ($\lambda = 1.5418$ Å).

Параметр кубической ячейки $a = 5.484$ Å. На каких углах 2θ с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения ($\lambda = 1.5418$ Å) могут быть зарегистрированы следующие рефлексы: 111; 200; 220; 311; 222; 400; 331?

По спектру ПМР определить структуру соединения с брутто-формулой $\text{C}_8\text{H}_{11}\text{NO}$.

Объясните общий вид спектра ЭПР ион-радикала тетраазанафталина $\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_4^+$:

Спектр ПМР соединения ($\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$) представляет собой триплет, квадруплет и мультиплет с отношением интегральных интенсивностей 3:2:5 и химическими сдвигами 1,3; 4,0 и 7,1. Изобразите вид спектра и определите структуру молекулы.

В ИК-спектре поглощения молекулы CO наблюдаются полосы $\omega = 2143.3$; 4260.1 и 6350.4 см⁻¹, интенсивность которых резко падает в сторону больших частот. Определите колебательную частоту ω_e , ангармоничность $\omega_e x_e$ и силовую постоянную k_e молекулы CO . $c = 3 \cdot 10^8$ м/с; $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; 1 а.е.м. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ кг.

Определить количество линий и соотношение их интенсивностей в спектре ЭПР радикалов CH_3^\bullet , CD_3^\bullet , CCl_3^\bullet . Ядра атомов ^1H , ^2D и ^{35}Cl имеют спины соответственно 1/2, 1 и 3/2.

Привести общий вид спектра ЯМР для всех магнитных ядер в молекулах а) CH_2F_2 ($I_F = 1/2$); б) $\text{CH}_3\text{-Cl}$ ($I_{\text{Cl}} = 3/2$); в) $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ ($I_D = 1$); г) NH_3 ($I_N = 1$); д) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-F}$ ($I_F = 1/2$).

Провести расшифровку масс-спектра бензола. Сопоставить основные (максимальные по интенсивности) пики с фрагментами молекулы C_6H_6 .

Оценочное средство - Контрольные вопросы

Экзамен

Критерии оценивания (Контрольные вопросы - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже

Оценка	Критерии оценивания
	«превосходно»
отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-4 (Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач)

Общая характеристика физических методов исследования. Спектр электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Классификация методов по областям электромагнитного излучения.

Рентгеноструктурный анализ – основной экспериментальный метод исследования кристаллов. Получение и взаимодействие рентгеновских излучений с веществом. Характеристическое и «белое» излучение. Селективные фильтры.

Физические основы электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Условие ЭПР. g-фактор и его значение. Магнетон Бора. Эфет Зеемана. Спин-решеточная и спин-спиновая релаксация.

Кристаллы и их основные свойства. Симметрия кристаллов. Элементарная ячейка. Сингонии, типы центрировки, решетки Бравэ. Пространственные (федоровские) группы.

Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним или несколькими ядрами. Константа сверхтонкого взаимодействия. Мультиплетность и распределение интенсивности спектра ЭПР. Основные параметры линии спектра ЭПР (интенсивность, ширина и форма линии, g-фактор).

Эффект Мессбауэра и условия его наблюдения Ядерная изомерия. Энергия отдачи и доплеровское уширение. Энергия испускаемых и поглощаемых гамма-квантов.

Физические основы явлений ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Спин ядра. Условие ЯМР. Заселенность уровней энергии. Правила отбора.

Колебательные состояния молекул согласно классической теории. Колебания двухатомной молекулы. Гармонический и ангармонический осциллятор. Потенциал Морзе. Силовая постоянная молекулы. Нормальные колебания. Симметрия нормальных колебаний.

Тонкая структура спектров ЭПР. Крамеровское расщепление в нулевом внешнем поле для анизотропных систем. Блок-схема ЭПР-спектрометра, особенности эксперимента.

Вращательные спектры многоатомных молекул. Молекулы типов линейного, симметричного, сферического и асимметричного волчков. Системы вращательных уровней энергии.

Химический сдвиг в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер. Мультиплетная структура спектров ЯМР. Константы спин-спинового взаимодействия.

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация переходов по Малликену и Каша. Правила отбора и нарушения запрета.

Получение мессбауэровских спектров и применение их в химии. Влияние химического окружения на эффект Мессбауэра. Химический (изомерный) сдвиг. Квадрупольные и магнитные взаимодействия.

Определение геометрических параметров молекул из микроволновых спектров. Методы наблюдения вращательных спектров. правила отбора.

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-5 (Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности)

1. Принципы работы кристаллографической базы данных FindIt
2. Принципы работы программного обеспечения для обработки колебательных спектров поглощения/пропускания IR Solution
3. Принципы работы программного обеспечения для уточнения кристаллической структуры по методу Ритвельда Toras

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Пентин Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии : учебник для студентов вузов, обучающихся по спец. 01100 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия". - М. : Мир : АСТ, 2003. - 683 с. : ил. - (Методы в химии). - ISBN 5-03-003470-6 (Мир). - ISBN 5-17-018760-2 (АСТ) : 292.49., 1 экз.
2. Пахомов Лев Георгиевич. Физические методы в химических исследованиях : (теория, задачи, ответы) : учебное пособие / Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского. - Н. Новгород : Изд-во ННГУ, 2007. - 286 с. - В надзаг.: Приоритетный нац. проект "Образование". Инноват. образоват. программа Нижегор. ун-та: Образоват.-науч. центр "Информационно-телекоммуникационные системы: физические основы и математическое обеспечение". - ISBN 978-5-91326-030-7 : 37.00., 3 экз.

3. Конюхов В. Ю. Методы исследования материалов и процессов : учебное пособие / В. Ю. Конюхов, И. А. Гоголадзе, З. В. Мурга. - 2-е изд. ; испр. и доп. - Москва : Юрайт, 2023. - 179 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-13938-9. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=848021&idb=0>.
4. Милантьев В. П. Атомная физика : учебник и практикум / В. П. Милантьев. - 2-е изд. ; испр. и доп. - Москва : Юрайт, 2023. - 415 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-15939-4. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=843099&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Пентин Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии : учебник для студентов вузов, обучающихся по спец. 01100 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия". - М. : Мир : АСТ, 2003. - 683 с. : ил. - (Методы в химии). - ISBN 5-03-003470-6 (Мир). - ISBN 5-17-018760-2 (АСТ) : 292.49., 1 экз.
2. Драго Р. Физические методы в химии. Ч. 1 / пер. с англ. Соловьянова А. А. ; под ред. Реутова О.А. - М. : Мир, 1981. - 419 с. - 2.20., 3 экз.
3. Драго Рассел. Физические методы в химии : [в 2 т.]. [Т.] 2 / пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова. - М. : Мир, 1981. - 456 с. : ил. - 2.30., 3 экз.
4. Ковба Л. М. Рентгенография в неорганической химии : [учеб. пособие для вузов по специальности "Химия"]. - М. : Изд-во МГУ, 1991. - 254, [1] с. : ил. - 8.25., 13 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

<http://www.cryst.ehu.es/>
<http://www.crystallography.net/cod/>
https://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Nuclear_Magnetic_Resonance/
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>
<http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de/>
http://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Автор(ы): Буланов Евгений Николаевич, кандидат химических наук.

Заведующий кафедрой: Князев Александр Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 10.11.2022 г., протокол № 2.