

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра теоретичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“_____” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізичні методи дослідження

напряму підготовки 0703 хімія
для спеціальності 8.070301 хімія

хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків

Робоча програма навчальної дисципліни „Фізичні методи дослідження” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Стародуб Володимир Олександрович, д.х.н., професор кафедри теоретичної хімії, Зіolkовський Дмитро Володимирович, к.х.н., ст. викл. кафедри теоретичної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної хімії

Протокол № _____ р.

Завідувач кафедри _____ А. М. Жолновач

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № ____ від “ ____ ” _____ 20__ р.

“ ____ ” _____ 20__ р.

Голова _____

О.І. Юрченко

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів 2	Напрямок підготовки 0703 хімія	нормативна	
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин 108		4 -й	5 -й
		Семестр	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4 самостійної роботи студента – 3.7	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	7 -й	9 -й
		Лекції	
		28 год.	10 год.
		Практичні	
		28 год.	- год.
		Самостійна робота	
52 год.	94 год.		
		Вид контролю: залік	

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: Сформувати уявлення про сучасні методи дослідження у хімії, а також сформувати вміння самостійно використовувати різноманітні фізичні методи дослідження для вивчення електронної будови та структури речовини.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: понятійний апарат, концепції та методи використання фізичних методів дослідження (ФМД) в хімії, теорію взаємодії електромагнітних коливань з речовиною, узагальнені правила відбору для переходів різної природи, основані на методах теорії груп. Фізичні засади методів мікрохвильової, інфрачервоної спектроскопії, електронної спектроскопії, рентген- та фотоелектронної спектроскопії, мас-спектроскопії (у тому числі ІЦР та електроспрей-спектроскопія), рентгеновської спектроскопії, магнітно-резонансні методи (ЯМР та ЕПР), ядерної квадрупольної а також мессбауеровської спектроскопії.

вміти: використовувати фізичні методи дослідження для розв'язання як класичних, так і актуальних проблем хімії; обґрунтовано обирати методи дослідження для вирішення задач та обробляти одержані результати.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1.

Тема 1. Загальна характеристика ФМД. Енергетичні характеристики та характеристичні часи методів, їх чутливість та дозволяючі здатність.

Тема 2. Мас-спектрометрія. Техніка експерименту в мас-спектрометрії, методи іонізації. Іонний струм та переріз іонізації. Залежність перерізу іонізації від енергії збудження. Типи іонів в мас-спектрометрії. Мас-спектрометрія негативних іонів. Основні типи мас-спектрометрів. Застосування мас-спектрометрії. Інтерпретація мас-спектрів, вплив ізотопії. Визначення потенціалів іонізації та енергії спорідненості до електрону енергій розриву хімічного зв'язку. Термодинамічні дослідження.

Тема 3. Мікрохвильові спектри молекул. Ефект Штарка для лінійних молекул та молекул типу симетричної та асиметричної дзиги. Визначення дипольних моментів молекул у основному та збудженому станах по обертовим спектрам.

Тема 4. Електронографія як метод визначення геометричних параметрів молекул

Тема 5. Коливальна спектроскопія. Аналіз нормальних коливань за експериментальними даними. Характеристичність нормальних коливань, позитивна якість та обмеження концепції характеристичності.

Тема 6. Застосування методів коливальної спектроскопії для визначення структури, електронної будови речовин, міжмолекулярної взаємодії. Техніка та методика ІЧ та КР спектроскопії. Лазерна спектроскопія.

Тема 7. УВ-спектроскопія. Класифікація електронних переходів. Методи інтерпретації електронних спектрів. Класифікація та віднесення електронних переходів. Застосування УВ - спектроскопії у якісному, структурному та кількісному аналізах.

Тема 8. Особливості спектрів координаційних сполук, органічних радикалів та КПЗ. Екситони.

Модуль 2.

Тема 9. Магнітно-резонансна спектроскопія – фізичні основи; поняття про спінгамільтоніан; хімічний зсув та його природа; принципи аналізу спектрів ЯМР. Застосування ЯМР у структурній хімії, хімічній термодинаміці, якісному та кількісному аналізах.

Тема 10. Застосування ЕПР у хімії комплексних сполук, органічних радикалів, у дослідженні механізмів реакції.

Тема 11. Ефект Мьоссауера та його роль в хімії твердого тіла. Ізомерний, хімічний та релятивістський зсуви у спектрах ЯГР, їх виникнення та роль у хімії. Ефекти Допплера першого та другого порядку у спектрах ЯГР.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин									
	Денна форма					Заочна форма				
	Усього	у тому числі				Усього	у тому числі			
л		п	лаб	ср	л		п	лаб	ср	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Модуль 1										
Тема 1	6	2	2		2		1			
Тема 2	10	4	2		4		1			
Тема 3	8	2	2		6		1			
Тема 4	8	2	2		6					

Тема 5	11	3	4		4		1			
Тема 6	11	3	4		6		1			
Тема 7	10	2	4		4		1			
Тема 8	10	2	4		4		1			
Разом за модулем 1	74	20	24		36		7			
Модуль 2										
Тема 9	9	3	2		4		1			
Тема 10	6	3	1		6					
Тема 11	5	2	1		6					
Разом за модулем 2	20	8	4		16		1			
Усього годин	108	28	28		52		8			

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Задачі на характеристичний час методу; порівняння енергетичних шкал різних методів.	2
2	Задачі по мас-спектрометрії з урахуванням ізотопного складу молекул.	2
3	Заняття по основам теорії груп та їх лінійних зображень	4
4	Задачі по коливальним спектрам молекул та іонів: аналіз частот і форм нормальних коливань; класифікація їх за симетрією; побудова координат симетрії за методом оператора проектування.	8
5	Задачі по електронним спектрам молекул: класифікація електронних станів; побудова групових орбіталей; аналіз імовірності електронних переходів.	8
6	Задачі по ЯМР та ЯКР спектроскопії	4

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Загальна характеристика методів. Взаємодія випромінювання з речовиною: поглинання, випромінювання, розсіяння, фотоефект, дифракція. Енергетичні характеристики та характеристичні часи методів, їх чутливість та дозволяючі здатність.	2
2	Застосування мас-спектрометрії. Інтерпретація мас-спектрів, вплив ізотопії. Кореляція між мас-спектрами та молекулярною структурою. Визначення потенціалів іонізації та енергії спорідненості до електрону енергій розриву хімічного зв'язку. Термодинамічні дослідження.	4
3	Методи визначення геометричних параметрів та симетрії молекул з обертових спектрів поглинання та комбінаційного розсіяння. Обмеження метода.	4

Для зарахування кожного р модулів студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем. Для одержання заліку студент повинен набрати не менше 50 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	зараховано
80-89	B	
70-79	C	
60-69	D	
50-59	E	
1-49	FX	незараховано

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Електронні конспекти лекцій.

11. Рекомендована література

Базова

1. Драго Р. Физические методы в химии, в 2-х томах. М., Мир, 1981 г.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В., Физические методы исследования в химии, М., Мир, 2003 г.
3. Бенон К. основы молекулярной спектроскопии. М., Мир, 1985 г.
4. Тюлин В.И. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, М., МГУ, 1987 г.
5. Вукс М.Ф. Электрические и оптические свойства молекул и конденсированных сред, Л., ЛГУ, 1984 г.
6. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Л., ЛГУ, 1987 г.

Допоміжна

1. Семин Г.К., Бабушкина Т.А., Якобсон Г.Г. применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л., Химия, 1972 г.
2. Керрингтон А., мак-Лечлан С. Магнитный резонанс и его применение в химии. М., Мир, 1970 г.
3. Химические применения мессбауэровской спектроскопии. Ред. Гольданский В.И. М., Наука, 1970 г.

4. Нефедов В.И. Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений. М., Химия, 1984 г.
5. Мазалов Л.Н. Рентгеновские спектры и химическая связь. Новосибирск, Наука, 1982 г.
6. Стародуб В.А. Применение теории групп в химии. Харьков, ХГУ, 1987 г.