

Аннотация программы

дисциплины

**«ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ
ИССЛЕДОВАНИЯ В ХИМИИ»**

**направление подготовки
(специальность)**

240100.68 - Химическая технология

квалификация выпускника Магистр

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ В ХИМИИ

Аннотация

Цель освоения дисциплины: является формирование у студентов более углубленных знаний в области использования теоретических методов исследования в химии, а так же современных инструментальных методов для определения элементного состава, строения и структуры химических соединений.

Дисциплина базируется на курсах цикла естественно-научных дисциплин, входящих в модули: физико-химические методы анализа, физическая химия, органическая химия, изучаемые в бакалавриате.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.

Содержание дисциплины

Модуль 1. Теоретические методы исследования. Расчетные методы квантовой химии. Атом в расчетных методах. Базисные функции. Молекулярные орбитали. Гамильтониан взаимодействия. Приближение Борна-Опенгеймера. Полуэмпирические, неэмпирические и эмпирические методы квантовой химии.

Модуль 2. Экспериментальные методы исследования. Классификация инструментальных методов исследования. Краткая характеристика.

Модуль 3. Масс-спектрометрия. Краткие сведения о масс-спектрометрии. Принципиальная схема масс-спектрометра. Хромато-масс-спектрометрия. Методы ионизации. Методы разделение ионов. Основные характеристики масс-спектрометра. Расшифровка масс-спектров. Качественный и количественный анализ.

Модуль 4. Методы магнитного резонанса (ЯМР, ЭПР). Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Области применения. Приборы и оборудование. Блок-схема спектрометра ЯМР. Основы теории ЯМР-спектроскопии. Методология обработки спектра. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Принципы спектроскопии ЭПР. Параметры и структура спектров ЭПР. Основные взаимодействия.

Модуль 5. Колебательная спектроскопия (ИК-, КР-спектроскопия). Инфракрасная спектроскопия (ИК). Уровни энергии и переходы между ними. Шкала электромагнитных волн и диапазоны спектральных методов. Инфракрасные спектры. Приборы. Источники и приемники ИК излучения. Блок-схема и принцип работы спектрофотометра. Форма инфракрасных полос поглощения. Спектроскопия комбинированного рассеяния (КР). Спектры комбинированного рассеяния. Качественный и количественный анализ по спектрам КР.

Модуль 6. Электронная УФ- видимая спектроскопия. Особенности ультрафиолетовых и видимых спектров поглощения. Принципиальная схема спектрофотометра. Классификация электронных состояний и переходов. Типы полос поглощения. Пространственные внутри- и межмолекулярные эффекты в электронных спектрах.

Модуль 7. Рентгеноструктурный анализ. Природа рентгеновских лучей, их спектры. Поглощение рентгеновских лучей. Детекторы рентгеновского излучения. Принципы методов рентгеноструктурного анализа. Метод Лауэ. Метод вращения кристалла. Метод порошка. Рентгеновская дифрактометрия.

Модуль 8. Термический анализ. Термогравиметрия. Дифференциальный термический анализ. Дифференциальная сканирующая калориметрия.

Основная литература

1. Полуэктова, В.А. Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии: учебное пособие. – Белгород: Изд-во БГТУ им. В.Г. Шухова, 2013. – 123 с.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М: Мир, 2009.
3. Отто М. Современные методы аналитической химии (в 2-х томах). М: Техносфера, 2003.– 416 с.
4. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир, 2008.– 398 с.

Дополнительная литература

5. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М: Высш. шк., 1987.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М: Высш. шк., 1989.
7. Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. М: Мир, 1991.
8. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
9. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР. М: Мир, 1981.
10. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М: Мир, 1984.
11. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических молекул. Л: Высшая школа, 1984.
12. Вульфсон Н.С., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектроскопия органических соединений. М: Химия, 1986.

Справочная и нормативная литература

1. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М.: Мир, 1976. – 546 с.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.

1. <http://www.ihtik.lib.ru/>
2. <http://www.y10k.ru/books/>
3. <http://194.67.119.21:89/GetContentForm.asp>
4. <http://www.anchem.ru/literature/>
5. <http://www.chem.msu.su/rus>
6. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
7. <http://www.uspkhim.ru/>
8. <http://www.strf.ru/database.aspx>