

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет
Кафедра аналитической и фармацевтической химии



«Утверждаю»
Проректор по научной работе и
инновациям
Н.А. Ашурбеков
«15» марта 2021 г.

Рабочая программа дисциплины

«Современные физико-химические методы исследования»

по направлению подготовки: 04.06.01 Химические науки

Уровень образования: подготовка кадров высшей квалификации
(аспирантура)

Направленность (профиль) аналитическая химия, физическая химия,
органическая химия, электрохимия

Квалификация (степень) выпускника: «Исследователь. Преподаватель-
исследователь»

Статус дисциплины: дисциплина по выбору

Махачкала 2021

Рабочая программа дисциплины «Современные физико-химические методы исследования» составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки: 04.06.01 Химические науки квалификация выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

от «30» июля 2014 г. №869.

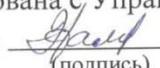
Разработчик(и): кафедра аналитической и фармацевтической химии, Рамазанов Арсен Шамсудинович, д.х.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры аналитической и фармацевтической химии
от «28» января 2021 г., протокол № 6.

Зав. кафедрой  (подпись) Рамазанов А.Ш.

на заседании Методической комиссии химического факультета
от «19» февраля 2021 г., протокол №6.

Председатель  Гасангаджиева У.Г.

Рабочая программа дисциплины согласована с Управлением аспирантуры и докторантуры « 15 » 03 2021 г.  (подпись) Рамазанова Э.Т.

Аннотация

Дисциплина «Современные физико-химические методы исследования» входит в блок Б1.В.ДВ.2 вариативную часть дисциплин по выбору базовой части образовательной программы аспирантуры по направлению 04.06.01 – Химические науки.

Дисциплина реализуется на факультете химическом кафедрой аналитической и фармацевтической химии

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с углубленным изучением теоретических, методологических основ современных физико-химических методов исследования различных объектов, а также конструктивных особенностей современных приборов, для проведения этих исследований.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: универсальных- УК-1, УК-2; общепрофессиональных – ОПК -1; профессиональных – ПК-1, ПК- 2, ПК-3, ПК-6.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе 72 в академических часах по видам учебных занятий.

1. Область применения и нормативные ссылки

Настоящая программа учебной дисциплины устанавливает минимальные требования к знаниям и умениям обучающегося в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации и определяет содержание и виды учебных занятий и отчетности.

Программа предназначена для преподавателей, ведущих данную дисциплину, и обучающихся направления подготовки 04.06.01. Химические науки, изучающих дисциплину «Современные физико-химические методы исследования».

Программа разработана в соответствии с:

- Федеральным государственным образовательным стандартом <http://science.dgu.ru/eduprogram/04.06.01.pdf>, утвержденным приказом Минобрнауки РФ от 30 июля 2014г.№869;
- Образовательной программой 04.06.01 Химические науки;
- Учебным планом университета по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утвержденным в 2020 г.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий 72 академических часа.

Се- местр	Учебные занятия						СРС, в том числе зачет	Форма про- межуточной атте- стации (зачет)
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
		Лек- ции	Лабора- торные за- нятия	Практи- ческие занятия	КСР	консуль- тации		
2 сем.	72	10	16	-	-	-	46	зачет

Цели и задачи освоения дисциплины:

Целью освоения дисциплины «Современные физико-химические методы исследования» формирование у аспирантов углубленных профессиональных знаний теоретических основ современных физико-химических методов исследования различных объектов, а также конструктивных особенностей современных приборов, для проведения этих исследований.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

В результате освоения программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине (модулю):

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ОПОП <i>Содержание компетенций*</i>	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
УК-1	способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	<p>знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.</p> <p>уметь: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов.</p> <p>владеть: навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.</p>
УК-2	способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	<p>знать: Основные концепции современной философии науки, основные стадии эволюции науки, функции и основания научной картины мира.</p> <p>уметь: использовать положения и категории философии науки для анализа и оценивания различных фактов и явлений.</p> <p>владеть: навыками анализа основных мировоззренческих и методологических</p>

		проблем, в.т.ч. междисциплинарного характера, возникающих в науке на современном этапе ее развития.
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<p>знать: цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов.</p> <p>уметь: составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты.</p> <p>владеть: систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме.</p>
ПК-1	наличие представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии	<p>знать: современное состояние науки в области современной теоретической и экспериментальной химии.</p> <p>уметь: представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях.</p> <p>владеть: методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области современной теоретической и экспериментальной химии.</p>

ПК-2	знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков	<p>знать: теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач.</p> <p>уметь: анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии.</p> <p>владеть: навыками обработки и анализа научно-технической информации и результатов отдельных этапов работ с учетом теоретических основ традиционных и новых разделов химии.</p>
ПК-3	владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой диссертации)	<p>знать: методы построения моделей изучаемых объектов.</p> <p>уметь: анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы.</p> <p>владеть: навыками планирования, анализа и обобщения результатов эксперимента.</p>
ПК-6	наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях	<p>знает: риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи и приемах речевого воздействия на русском языке.</p> <p>умеет: использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на государственном и иностранном языке.</p> <p>владеет: навыками создания на русском языке письменных и устных текстов научного и официально-делового стилей речи для обеспечения профессиональной деятельности.</p>

В результате изучения дисциплины обучающийся осваивает следующие компетенции:

Компетенция	Код по ФГОС	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенции
универсальные	УК-1	<p><i>знает</i> методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.</p> <p><i>умеет</i> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов.</p> <p><i>владеет</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.</p>	<p>Защита отчета. Контроль выполнения индивидуального задания</p>
	УК-2	<p><i>знает</i> основные концепции современной философии науки, основные стадии эволюции науки, функции и основания научной картины мира.</p> <p><i>умеет</i> использовать положения и категории философии науки для анализа и оценивания различных фактов и явлений.</p> <p><i>владеет</i> навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в.т.ч. междисциплинарного характера, возникающих в науке на современном этапе ее развития.</p>	<p>Защита отчета. Контроль выполнения индивидуального задания</p>
общефессиональные	ОПК-1	<p><i>владеет</i> навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.</p>	<p>лекции, лабораторная работа, самостоятельная работа</p>

		<p><i>осуществляет</i> личный выбор в различных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом.</p> <p><i>знает</i> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.</p>	устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
профессиональные	ПК-1	<p><i>проводит</i> и протоколирует химические эксперименты разного уровня сложности.</p> <p><i>способен</i> проводить экспериментальные работы разного уровня сложности и обрабатывать полученные результаты.</p> <p><i>умеет планировать</i> экспериментальную часть проектных и исследовательских работ, анализировать и обобщать результаты эксперимента.</p>	<p>лекции, лабораторная работа, самостоятельная работа</p> <p>устный опрос, контрольная работа, коллоквиум</p>
	ПК-2	<p><i>выполняет</i> необходимые действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин.</p> <p><i>способен</i> использовать теоретические основы химии при планировании и организации работ по решению задач профессиональной сферы деятельности.</p> <p><i>использует знания</i> теоретических основ традиционных и новых разделов химии при решении задач профессиональной сферы деятельности.</p>	<p>лекции, лабораторная работа, самостоятельная работа</p> <p>устный опрос, контрольная работа, коллоквиум</p>
	ПК-3	<p><i>способен</i> планировать экспериментальную часть проектных и исследовательских работ, анализировать и обобщать результаты эксперимента.</p>	<p>лекции, лабораторная работа, самостоятельная работа</p> <p>устный опрос, контрольная работа, коллоквиум</p>

		<p><i>описывать</i> проводимых исследований, подготовка данных для составления отчетов о выполнении заданий.</p> <p><i>аккумулировать</i> знания в профессиональной области и представлять их согласно заданным требованиям оформления.</p>	
	ПК-6	<p><i>знает</i> риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи и приемах речевого воздействия на русском языке.</p> <p><i>умеет</i> использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на государственном и иностранном языке.</p> <p><i>владеет</i> навыками создания на русском языке письменных и устных текстов научного и официально-делового стилей речи для обеспечения профессиональной деятельности.</p>	<p>лекции, лабораторная работа, самостоятельная работа</p> <p>устный опрос, контрольная работа, коллоквиум</p>

3. Место дисциплины в структуре ОПОП

Изучение данной дисциплины базируется на следующих дисциплинах, прохождении практик: Современные электрохимические методы анализа, Современные спектроскопические методы анализа, Современные хроматографические методы анализа, Методы колебательной спектроскопии в химическом анализе, Теория и практика капиллярного электрофореза, Современные проблемы в химии.

Для освоения учебной дисциплины, обучающиеся должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

- Современные электрохимические методы анализа: универсальные компетенции: профессиональные компетенций ПК- 1, 2.
- Современные спектроскопические методы анализа: профессиональные компетенции: ПК-2, 3.
- Современные хроматографические методы анализа: профессиональные компетенции: ПК-2, 3.
- Методы колебательной спектроскопии в химическом анализе: профессиональные компетенций ПК-2, 3.
- Теория и практика капиллярного электрофореза: профессиональные компетенции ПК-2, 3.

Современные проблемы в химии: универсальные компетенции УК-1; общепрофессиональные компетенции ОПК-1; профессиональные компетенции – ПК-1, 2.

Основные положения дисциплины должны быть использованы в дальнейшем при изучении следующих за ней дисциплин:

- Нанохимия и высокие технологии

4. Объем, структура и содержание дисциплины

4.1. Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Курс	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Контроль самост. раб.		
1.	Оптические методы исследования. Атомная спектроскопия. Методы атомного спектрального анализа	3	-	-	-	-	4	устный опрос, контрольная работа
2.	Спектроскопические методы исследования	3	2	-	4	-	6	устный опрос, контрольная работа коллоквиум
3.	Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская)	3	2	-	2	-	4	устный опрос, контрольная работа коллоквиум
4.	Люминесценция и люминесцентные методы	3	-	-	-	-	4	устный опрос, контрольная работа
5.	Рентгеноструктурный анализ	3	-	-	-	-	4	устный опрос, контрольная работа
6.	Рефрактометрия	3	-	-	-	-	4	устный опрос, контрольная работа
7.	Резонансные методы	3	-	-	-	-	4	устный опрос, контрольная работа
8.	Методы масс-спектрометрии	3	2	-	4	-	6	устный опрос, контрольная работа коллоквиум
9.	Хроматографический анализ. Способы осуществления качественного хроматографического анализа. Идентификация веществ по параметрам удерживания	3	2	-	4	-	6	устный опрос, контрольная работа коллоквиум

10.	Капиллярный электрофорез	3	2	-	2	-	4	устный опрос, контрольная работа коллоквиум 72 зачет
	ИТОГО:	3	10	-	16	-	46	

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам.

Модуль 1. Спектроскопические методы исследования.

Общая характеристика и классификация методов. Электромагнитное излучение, природа электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Поглощение, испускание, рассеяние. Основные законы светопоглощения и испускания. Светорассеяние. Физические и химические свойства молекул и веществ. Происхождение молекулярных спектров. Наблюдение и регистрация спектроскопических сигналов.

Модуль 2. Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская). Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии и их классификация. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Характеристичность нормальных колебаний. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, структурно-группового, молекулярного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Техника и методики ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура для ИК спектроскопии, приготовление образцов. Аппаратура для спектроскопии КР. Сравнение методов ИК и КР, их преимущества и недостатки. Туннельная колебательная спектроскопия. Оптическое детектирование одиночных молекул.

Модуль 3. Методы масс-спектрометрии. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация и др. Комбинированные методы. Ионный ток и сечение ионизации. Зависимость сечения ионизации от энергии ионизирующих электронов. Потенциалы появления ионов. Типы ионов в масс-спектрометрах - молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные. Разрешающая сила масс-спектрометра. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Таблицы массовых чисел. Соотношение изотопов. Корреляции между молекулярной структурой и масс-спектрами. Представление о хромато-масс-спектрометрии.

Модуль 4. Хроматографический анализ. Способы осуществления качественного хроматографического анализа. Идентификация веществ по параметрам удерживания. Типовые задачи и основные экспериментальные приемы качественного анализа. Характеристики удерживания в КХА.

Модуль 5. Капиллярный электрофорез. Основные положения. Метрологические характеристики. Области применения. Электроосмотический поток. Физико-химические основы разделения. Конструктивные особенности прибора для капиллярного электрофореза. Капиллярный зонный электрофорез. Возможности метода. Движение и размывание зон. Мицеллярный капиллярный электрофорез. Капиллярный гель-электрофорез

5. Оценочные средства для текущего контроля и аттестации обучающегося

Вопросы по текущему контролю

1. Методы исследования веществ - физические, химические и физико-химические. Классификация методов исследования. Общая характеристика методов.
2. **Оптические методы исследования.** Атомная спектроскопия. Методы атомного спектрального анализа.
3. **Спектроскопические методы исследования.** Общая характеристика и классификация методов. Электромагнитное излучение, природа электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Поглощение, испускание, рассеяние. Основные законы светопо-

глощения и испускания. Светорассеяние. Физические и химические свойства молекул и веществ. Происхождение молекулярных спектров. Наблюдение и регистрация спектроскопических сигналов.

4. **Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская).** Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии и их классификация. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Характеристичность нормальных колебаний. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, структурно-группового, молекулярного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Техника и методики ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура для ИК спектроскопии, приготовление образцов. Аппаратура для спектроскопии КР. Сравнение методов ИК и КР, их преимущества и недостатки. Туннельная колебательная спектроскопия. Оптическое детектирование одиночных молекул.

5. **Люминесценция и люминесцентные методы.** Виды люминесценции. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Основные закономерности молекулярной фотолюминесценции. Тушение люминесценции (температурное, концентрационное, посторонними веществами). Квантовый выход. Флуорометрический метод анализа. Аппаратурное оформление процесса.

6. **Рентгеноструктурный анализ.**

7. **Рефрактометрия.** Электрические и оптические свойства молекул. Электронная, атомная и ориентационная поляризация. Поляризация деформации. Дисперсия света. Применение молекулярной рефракции и дисперсии для установления строения молекул. Рефрактометрические константы как критерий чистоты вещества и средство идентификации.

8. **Резонансные методы.** Метод ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Протонный магнитный резонанс. Метод двойного резонанса. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Схема спектрометра ЯМР. Сравнение метода ЯМР с другими методами, его достоинства и ограничения. Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного резонанса. Условие ЭПР. g-Фактор и его значение. Применение метода ЭПР в химии.

9. **Методы масс-спектрометрии.** Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация и др. Комбинированные методы. Ионный ток и сечение ионизации. Зависимость сечения ионизации от энергии ионизирующих электронов. Потенциалы появления ионов. Типы ионов в масс-спектрометрах - молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные. Разрешающая сила масс-спектрометра. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Таблицы массовых чисел. Соотношение изотопов. Корреляции между молекулярной структурой и масс-спектрами. Представление о хромато-масс-спектрометрии.

10. **Хроматографический анализ. Способы осуществления качественного хроматографического анализа. Идентификация веществ по параметрам удерживания.** Типовые задачи и основные экспериментальные приемы качественного анализа. Характеристики удерживания в КХА.

11. **Капиллярный электрофорез.** Электроосмотический поток. Физико-химические основы разделения. Конструктивные особенности прибора для капиллярного электрофореза.

12. Капиллярный зонный электрофорез. Возможности метода. Движение и размывание зон.

13. Мицеллярный капиллярный электрофорез. Капиллярный гель-электрофорез.

Примерный перечень вопросов к зачету по всему курсу и к каждому промежуточному контролю для самопроверки обучающихся.

Вопросы по итоговому контролю

Коллоквиум 1

Спектроскопические методы исследования

1. Спектр электромагнитного излучения, его основные характеристики и способы их выражения (длина волны, частота, волновое число, поток излучения, интенсивность). Ультрафиолетовая, видимая и инфракрасная области спектра. Классификация спектроскопических методов. Типы спектрометров.

2. Спектры атомов. Основные и возбужденные электронные состояния атомов, характеристики состояний. Энергетические переходы. Законы испускания и поглощения. Характеристики спектральных линий: положение в спектре, интенсивность, полуширина. Связь интенсивности с числом излучающих частиц.

3. Спектры молекул. Представление полной энергии молекул как суммы электронной, колебательной и вращательной. Особенности молекулярных спектров. Зависимость вида спектра от агрегатного состояния вещества.

4. Способы монохроматизации лучистой энергии. Классификация спектральных приборов. Приемники излучения: фотоэмульсия, фотоэлементы, фотоумножители, полупроводниковые приемники излучения. Систематические аппаратные искажения.

Коллоквиум 2

Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская)

1. Теоретические основы ИК спектроскопии. Колебания и структура молекул.

2. Качественный анализ. Классификация методов: анализ смеси органических веществ, идентификация индивидуального соединения, структурно-групповой анализ. Подготовка проб к анализу. Выбор оптимальных условий записи спектра: толщина поглощенного слоя, рабочий диапазон длин волн, скорость сканирования, ширина щелей.

3. Количественный анализ по ИК – спектрам: причины отклонения от закона Бугера – Ламберта – Бера, методы количественного анализа (по градуировочному графику, метод внутреннего стандарта, дифференциальный метод). Спектры поглощения и отражения. Анализ смесей. Условия проведения анализа.

4. Современные методы ИК спектроскопии. ИКС диффузного отражения с Фурье-преобразованием. Примеры применения.

Коллоквиум 3

Методы масс-спектрометрии

1. Принцип метода.

2. Классификация методов по типам источников получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, масс-спектрометрия тлеющего разряда, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов).

3. Типы масс-анализаторов (статические, динамические, времяпролетные) и основные принципы их работы.

4. Масс-спектрометрия низкого и высокого разрешения.

5. Структурная масс-спектрометрия (идентификация органических веществ). Фрагментация молекул в органической масс-спектрометрии (диссоциация, перегруппировка).

6. Приемы повышения выхода молекулярного иона.

7. Изотопные соотношения. Метод изотопного разбавления.

Коллоквиум 4

Хроматографический анализ

1. На чем основан принцип разделения сложных смесей в газовой хроматографии?

2. В чем заключается принципиальное отличие газового хроматографа от жидкостного?

3. Что такое газ-носитель? Какие требования предъявляются к газу-носителю?

4. Какие дозаторы применяют в газовой хроматографии?

5. Чем отличаются хроматографические колонки в газовой хроматографии от колонок в жидкостной хроматографии?

6. Какие детекторы используют в газовой хроматографии? На чем основан принцип действия катарометра?

7. Какие практические задачи можно решить с помощью газовой хроматографии?
8. Как провести идентификацию вещества с помощью газового хроматографа?
9. Как провести количественный анализ методом газовой хроматографии.

Коллоквиум 5

Капиллярный электрофорез

1. Физико-химические основы метода капиллярного электрофореза.
2. Варианты капиллярного электрофореза.
3. Достоинства метода капиллярного электрофореза.
4. Области применения метода капиллярного электрофореза.
5. Способы детектирования капиллярного электрофореза.
6. Особенность работы на системах Капель.

Примерные вопросы к зачету

1. Спектр атома водорода и водородоподобных ионов. Одноэлектронные спектры атомов с одним внешним s-электроном. Основы общей систематики сложных спектров. Спектры атомов с двумя внешними s-электронами. Спектры атомов с заполняющимися и заполненными р-оболочками. Спектры атомов с достраивающимися d- и f-оболочками.

2. Спектр электромагнитного излучения, его основные характеристики и способы их выражения (длина волны, частота, волновое число, поток излучения, интенсивность). Ультрафиолетовая, видимая и инфракрасная области спектра. Классификация спектроскопических методов. Типы спектрометров.

3. Спектры атомов. Основные и возбужденные электронные состояния атомов, характеристики состояний. Энергетические переходы. Законы испускания и поглощения. Характеристики спектральных линий: положение в спектре, интенсивность, полуширина. Связь интенсивности с числом излучающих частиц.

4. Спектры молекул. Представление полной энергии молекул как суммы электронной, колебательной и вращательной. Особенности молекулярных спектров. Зависимость вида спектра от агрегатного состояния вещества.

5. Способы монохроматизации лучистой энергии. Классификация спектральных приборов. Приемники излучения: фотоэмульсия, фотоэлементы, фотоумножители, полупроводниковые приемники излучения. Систематические аппаратные искажения.

6. Теоретические основы ИК спектроскопии. Колебания и структура молекул.

7. Качественный анализ. Классификация методов: анализ смеси органических веществ, идентификация индивидуального соединения, структурно-групповой анализ. Подготовка проб к анализу. Выбор оптимальных условий записи спектра: толщина поглощенного слоя, рабочий диапазон длин волн, скорость сканирования, ширина щелей.

8. Количественный анализ по ИК – спектрам: причины отклонения от закона Бугера – Ламберта – Бера, методы количественного анализа (по градуировочному графику, метод внутреннего стандарта, дифференциальный метод). Спектры поглощения и отражения. Анализ смесей. Условия проведения анализа.

9. Современные методы ИК спектроскопии. ИКС диффузного отражения с Фурье-преобразованием. Примеры применения.

10. Люминесцентный анализ. Теория молекулярной люминесценции. Возбуждение молекул. Дезактивация возбужденных молекул. Флуоресценция и фосфоресценция. Квантовый выход флуоресценции и фосфоресценции. Замедленная флуоресценция. Интенсивность люминесценции и зависимость ее от концентрации люминофора. Статическое и динамическое тушение люминесценции. Пути дезактивации возбужденных молекул при динамическом тушении. Эксплексы. Сенсibilизированная люминесценция. Концентрационное тушение. Эксимеры. Люминесценция и молекулярная структура. Люминесценция органических веществ и комплексов металлов с неорганическими и органическими лигандами. Рекомбинационная люминесценция кристаллофосфоров. Зонная схема рекомбинационного свечения. Особенности люминес-

ценции кристаллофосфоров. Люминесцентный анализ органических веществ. Метод селективного возбуждения спектров флуоресценции и фосфоресценции. Применение сенсibilизированной люминесценции при анализе смесей. Флуориметрические способы анализа смесей, основанные на предварительной химической обработке. Косвенные методы анализа смесей. Люминесцентный анализ неорганических веществ. Важнейшие люминесцентные органические реагенты. Использование люминесценции кристаллофосфоров. Косвенные методы анализа. Низкотемпературная люминесценция. Производная флуоресцентная спектрометрия. Флуоресцентная спектрометрия с синхронным возбуждением. Фосфориметрия с временным разрешением. Фазочувствительный метод регистрации флуоресценции.

11. Природа рентгеновских лучей, непрерывный и характеристический спектры, природа их возникновения.

12. Формула Вульфа-Брэгга.

13. Геометрическая интерпретация дифракции. Сфера Эвальда.

14. Структурный фактор.

15. Индексирование рентгенограмм в случае известной и неизвестной ячейки.

16. Методы количественного фазового анализа.

17. Формирование изображения в электронном микроскопе.

18. Формирование изображения в растровом электронном микроскопе.

19. Методы приготовления образцов для просвечивающего электронного микроскопа.

20. На чем основан рефрактометрический метод анализа?

21. Что такое показатель преломления? От каких факторов зависит показатель преломления?

22. Имеет ли показатель преломления размерность?

23. Что Вам известно о мольной рефракции? Как рассчитать мольную рефракцию? Что такое правило аддитивности?

24. Как по показателю преломления определить строение и полярность молекулы?

25. Чем определяется поляризация молекул при прохождении света?

26. Какие характеристики вещества можно вычислить, используя значения показателя преломления и диэлектрической проницаемости?

27. Почему мольная поляризация и мольная рефракция являются величинами аддитивными?

28. Почему мольная рефракция практически не зависит от температуры?

29. Какие практические задачи можно решать методом рефрактометрии?

30. Как идентифицировать вещество?

31. Как определить концентрацию двух- и трехкомпонентной системы?

32. Какие типы рефрактометров вам известны? Чем они принципиально различаются?

33. Что такое компенсатор дисперсии и каково его назначение?

34. 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.

35. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров. Характер образцов. ЯМР спектроскопия органических и неорганических веществ. Области применения.

36. Место ЭПР спектроскопии среди других спектроскопических методов. Принципы спектроскопии ЭПР. Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор. Связь анизотропии g-фактора с геометрией окружения парамагнитного центра. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Природа тонкого взаимодействия. Константы расщепления в нулевом поле. Интерпретация спектров ЭПР. Спектры ЭПР жидких растворов. Спектры ЭПР поликристаллов и твердых растворов. Спектры ЭПР монокристаллов. Особенности спектров ЭПР газов. ЭПР-спектроскопия в практике анализа. Изотопный анализ. Определение металлов. Опре-

деление физиологически активных веществ в биологических средах. Применение в археологии и палеонтологии. Контроль имитации драгоценных минералов. Применение в судебной медицине. ЭПР-спектроскопия в производственных процессах.

37. Принцип метода. Классификация методов по типам источников получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, масс-спектрометрия тлеющего разряда, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов). Типы масс-анализаторов (статические, динамические, времяпролетные) и основные принципы их работы. Масс-спектрометрия низкого и высокого разрешения. Структурная масс-спектрометрия (идентификация органических веществ). Фрагментация молекул в органической масс-спектрометрии (диссоциация, перегруппировка). Приемы повышения выхода молекулярного иона. Изотопные соотношения. Метод изотопного разбавления.

38. На чем основан принцип разделения сложных смесей в газовой хроматографии?

39. В чем заключается принципиальное отличие газового хроматографа от жидкостного?

40. Что такое газ-носитель? Какие требования предъявляются к газу-носителю?

41. Какие дозаторы применяют в газовой хроматографии?

42. Чем отличаются хроматографические колонки в газовой хроматографии от колонок в жидкостной хроматографии?

43. Какие детекторы используют в газовой хроматографии? На чем основан принцип действия катарометра?

44. Какие практические задачи можно решить с помощью газовой хроматографии?

45. Как провести идентификацию вещества с помощью газового хроматографа?

46. Как провести количественный анализ методом газовой хроматографии.

47. Физико-химические основы метода капиллярного электрофореза.

48. Варианты капиллярного электрофореза.

49. Достоинства метода капиллярного электрофореза.

50. Области применения метода капиллярного электрофореза.

51. Способы детектирования капиллярного электрофореза.

52. Особенность работы на системах Капель.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Основная литература

1. Основы аналитической химии. Химические методы анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.И. Мовчан [и др.]. – Электрон.текстовые данные. – Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2012. – 195 с. – 978-5-7882-1216-6. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/61991.html> (дата обращения: 23.05.2019).

2. Аналитическая химия. Физико-химические и физические методы анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.И. Мовчан [и др.]. – Электрон. текстовые данные. – Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2013. – 236 с. – 978-5-7882-1454-2. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/61958.html> (дата обращения: 23.05.2019).

3. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе / Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. - Издание второе, переработанное и дополненное. - Москва : Прометей, 2015. - 196 с. : схем., ил., табл. - ISBN 978-5-9906134-6-1 ; То же [Электронный ресурс]. - URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=426720> (23.05.2019).

6.2. Дополнительная литература

1. Аналитическая химия: химические методы анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / Е.Г. Власова [и др.]. – Электрон. текст. данные. – О.М. Петрухин, Л.Б. Кузнецова, под ред. – М.: Лаборатория знаний, 2017. – 462 с. – 978-5-906828-19-4. – Режим доступа: <https://www.book.ru/book/928910/view2/1> (дата обращения: 23.05.2019).

2. Валова (Копылова) В.Д. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа [Электронный ресурс]: практикум / В.Д. Валова (Копылова), Е.И. Паршина. – Электрон. текстовые данные. – М.: Дашков и К, 2015. – 199 с. – 978-5-394-01301-0. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/10905.html> (дата обращения 23.05.2019).

3. Филимонов, В.Е. Атомно-абсорбционный анализ [Электронный ресурс]: учеб. пособие / В.Е. Филимонов. — Электрон. дан. — Йошкар-Ола : ПГТУ, 2017. — 96 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/101140>. — Загл. с экрана.

4. Вершинин, В.И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента [Электронный ресурс]: учеб. пособие / В.И. Вершинин, Н.В. Перцев. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2017. — 236 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92623>. — Загл. с экрана. (дата обращения 23.05.2019).

6.3. Программное обеспечение

1. www.nanometer.ru;
2. www.confitor.ru;
3. www.nanotech.ru;
4. pubs.acs.org;
5. www.sciencedirect.com;
6. www.springer.com.

Для успешного освоения дисциплины, обучающийся использует следующие программные средства:

- Системные программные средства: Microsoft Windows XP, Microsoft Vista.
- Прикладные программные средства: Microsoft Office 2007 Pro, FireFox Специализированное программное обеспечение: СДО Moodle, SunRAV BookOffice Pro, SunRAV TestOfficePro, Navigator. html, Adobe Reader 9, Lizardech DjVu Control, Abbyy Finreders 8, Statistica 7, специализированные химические программы и др.

6.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 23.05.2019). – Яз. рус., англ.

2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения овсех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный (дата обращения: 23.05.2019).

3. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/> (дата обращения: 23.05.2019).

4. ЭБС book.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/ (дата обращения: 23.05.2019).

6.5. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины: Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучением: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru/> (дата обращения: 23.05.2019).

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные и научно-исследовательские лаборатории кафедры аналитической и фармацевтической химии №№ 14, 15, 16, 17, 19, 26 для проведения практических занятий оснащенные следующим оборудованием: Атомно – абсорбционный спектрометр согАА 700; Газо-жидкостный хроматограф JS-14A (Shimatzu, Япония); Спектрофлюориметрический анализатор «Флюорат- 02 Панорама»; Спектрофотометр СФ- 56 для снятия спектров УФ и видимой области, с приставкой диффузного отражения ПОД-6 и компьютерным интер-фейсом; Спектрофотометр СФ- 46 для снятия спектров УФ и видимой области; Сканирующий спектрофотометр Shimadzu UV-3600; Сканирующий электронный микроскоп LEO - 1450 с микрозондовым анализатором ISYS с системой EDX; ИК-Фурье спектрометр VERTEX 70 с расширенным спектральным диапазоном; Конфокальный КР - спектрометр - микроскоп SENTERRA 785; Автоматизированный спектрометр комбинационного рассеяния света ДФС-24; Акустооптический спектрометр Рамановского рассеивания РАОС-3; Рентгеновский дифрактометр XRD-7000S; Лазерный атомно-эмиссионный спектрометр LAES- Matrix; Комплекс для измерения текстурных характеристик дисперсных и пористых материалов "СОРБИ-MS"; Система капиллярного электрофореза «Капель-103»; Полярограф АВС 1.1; Потенциостат ПИ 50-1.

8. Образовательные технологии

В ходе освоения дисциплины предусматривается применение следующих активных методов обучения:

-Выполнение лабораторных работ с элементами исследования.

-Отчетные занятия по разделам «Спектроскопические методы исследования», «Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская)», «Методы масс-спектрометрии», «Хроматографический анализ. Способы осуществления качественного хроматографического анализа. Идентификация веществ по параметрам удерживания», «Капиллярный электрофорез».

-Выполнение аспирантами индивидуальной исследовательской работы по анализу реальных объектов с поиском и выбором метода и схемы определения на практических занятиях.

-Контрольные работы.

-Коллоквиумы.