

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ
МАТЕРИАЛОВ
ИМ. С.Н. ЕНИКОЛОПОВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ
НАУК
(ИСПМ РАН)**

ПРИНЯТО



Ученым советом ИСПМ РАН

Протокол № 12 от 18 июня 2015 г.

Председатель Ученого совета

член-корр. РАН  **А.Н. Озерин**

Рабочая программа дисциплины

**"СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ УСТАНОВЛЕНИЯ СТРОЕНИЯ
ВЕЩЕСТВА"**

по направлению подготовки - 04.06.01 Химические науки (уровень
подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность: 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения

МОСКВА 2015 год

Программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта, утверждённого Приказом Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. N 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)».

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины: Формирование фундаментальных знаний принципиальных основ, практических возможностей и ограничений важнейших для химиков современных физических методов исследования, применяемых для исследования строения и реакционной способности химических веществ, знакомство с их аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные.

Задачи дисциплины: Сформировать навыки и умения в области современных физико-химических методов исследования химических соединений; научить оптимальному выбору методов для решения поставленных задач; освоить интерпретацию и сопоставление всей совокупности имеющихся данных.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП

2.1. В соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом (ФГОС) данная дисциплина относится к Вариативной части Основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре, которая должна быть освоена аспирантом обязательно и в период обучения, отмеченный в базовом учебном плане.

«Современные методы установления строения вещества» - модуль основной образовательной программы по направлению подготовки - 04.06.01 «Химические науки», по специальности (направленности подготовки) 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИСПМ РАН, прошедших обучение по программам подготовки магистров и специалистов.

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления о физике электромагнетизма, в частности, о корпускулярно-

волновом дуализме, распределении спектральных методов по энергиям и длинам волн, понятие о колебательных и электронных квантовых переходах, элементарные знания о природе спинового резонанса, строении молекул и элементах симметрии.

2.3. Дисциплина «Современные методы установления строения вещества» необходима при подготовке к сдаче кандидатского экзамена по специальности, а также – написании и подготовке к защите выпускной квалификационной работы аспиранта.

3. Требования к результатам освоения дисциплины.

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ОПОП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Общепрофессиональных компетенций:

- ✓ способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- ✓ готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональных компетенций:

Направленность: 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения:

- Способность к использованию современных физико-химических методов установления строения вещества (ПК-10).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

знать:

- способы анализа имеющейся информации;
- методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий;
- сущность информационных технологий;
- современные теории строения вещества;
- базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества;

- возможности и границы применимости различных физико-химических методов исследования строения вещества;
- принципы изучения природы химических, фотохимических, радиационно-химических и электрохимических реакций;

уметь:

- ставить задачу и выполнять научные исследования при решении конкретных задач по органической химии с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств;
- применять теоретические знания по методам сбора, хранения, обработки и передачи информации с использованием современных компьютерных технологий;
- планировать стратегию установления строения вещества;
- рационально сочетать различные методы исследования строения вещества;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества;
- анализировать экспериментальные данные для определения термодинамических и кинетических характеристик изучаемых систем;

владеть:

- методами самостоятельного анализа имеющейся информации;
- практическими навыками и знаниями использования современных компьютерных технологий в научных исследованиях;
- современными компьютерными технологиями для сбора и анализа научной информации;
- методами и технологиями межличностной коммуникации;
- способами интерпретации данных, полученные различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества;
- навыками организации и проведения экспериментов по определению термодинамических и кинетических характеристик химических систем.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы - 108 часов согласно учебному плану.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Контактная раб.	Из них					Контроль
				Лекц.	Семинары	Практ.	СР		
1	Современные методы установления строения вещества	108	72		36	36		36	зачет

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Контроль
		Лек.	Сем.	Практ.	СР	
1	Электронная спектроскопия	4		4	4	
2	Колебательная спектроскопия	4		5	4	
3	Масс-спектрометрия	5		4	4	
4	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	7		8	8	
5	Основы симметрии молекул и кристаллов	3		4	8	
6.	Рентгенодифракционные методы исследования	4		2	4	
7.	Основы хроматографических методов	4		5	2	
8.	Элементный микроанализ	5		4	2	
	ИТОГО	36		36	36	

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Темы и содержание раздела	Форма проведения занятий
1	Электронная спектроскопия	<p>1. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях. Конструкция приборов (монокроматоры, спектрофотометры; однолучевые и двухлучевые приборы). Источники излучения, оптические материалы, детекторы. Используемые растворители. Способы изображения спектров.</p> <p>2. Спектры поглощения в видимой и УФ-областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах (σ-σ^*, σ-π^*, π-π^*, n-π^* и др. переходы). Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора для электронных переходов.</p> <p>Специфика электронных спектров поглощения различных классов органических соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Спектры ароматических соединений.</p> <p>Спектры координационных соединений. d-d-переходы, переходы с переносом заряда. Теория поля лигандов.</p> <p>3. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Анализ смесей, определение состава комплексов, определения констант диссоциации кислот. Биологические и биохимические приложения УФ-видимой спектроскопии.</p>	<p>Лекции, Практик.</p> <p>Лекции, Практик.</p> <p>Лекции, Практик.</p>
2	Колебательная спектроскопия	<p>1. Квантовомеханический и классический подход к описанию колебательных спектров. Колебания двухатомных молекул. Факторы влияющие на частоту колебания – масса атомов и силовые коэффициенты. Колебания многоатомных молекул. Основные колебания, обертоны и составные частоты.</p>	Лекции, Практик.

		<p>2. Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР. Изменение дипольного момента и поляризуемости молекул. Сравнение методов ИК-спектроскопии и КР для исследования молекулярных структур. Поляризация полос в спектрах КР. Сопоставление данных ИК и КР спектров для определения структуры молекул. Влияние агрегатного состояния и растворителей на спектры.</p> <p>3. Применение методов колебательной спектроскопии. Специфичность колебательных спектров. Применение для идентификации веществ, для качественного и количественного анализов и другие применения в химии.</p> <p>4. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, источники излучения, детекторы, прозрачные материалы. Приготовление образцов и методы измерения спектров. Инфракрасные фурье-спектрометры. Аппаратура спектроскопии КР, источники света, детекторы. Преимущества лазерных источников возбуждения.</p>	<p>Лекции</p> <p>Лекции, Практик.</p> <p>Практик.</p>
3	Масс-спектрометрия	<p>1. Конструкция и основные типы масс-спектральных приборов. Системы ввода пробы газов, жидкостей и твердых веществ. Источники ионов. Анализаторы масс. Системы регистрации ионов, система сбора и обработки данных.</p> <p>2. Методы ионизации молекул (ионизация электронами, фотоионизация, полевая ионизация и десорбция, атомная бомбардировка, электроспрей, матрично-активированная лазерная десорбция/ ионизация (МАЛДИ), резонансный захват электронов). Основные характеристики масс-спектрометров. Типы ионов.</p> <p>3. Структурно-аналитические задачи: установление элементного состава и строения молекул; изотопный анализ; качественный и количественный анализ смесей, хроматомасс-спектрометрия; определение микропримесей.</p> <p>4. Исследовательские задачи: исследование реакционной способности молекул и ионов в газовой фазе в условиях протекания процессов фрагментации и ионно-молекулярных реак-</p>	<p>Лекции, Практик.</p> <p>Лекции</p> <p>Лекции</p> <p>Лекции, Практик.</p>

		ций; исследование термодеструкции веществ, определение термохимических параметров молекул, ионов и радикалов (энергии ионизации, энергии появления ионов, энергии диссоциации связей, теплоты образования ионов, сродство к электрону и протону; теплоты сублимации).	
4	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	<p>1. Основы спектроскопии ЯМР. Принципы наблюдения магнитного резонанса в химии, ларморовская прецессия, резонанс в двухуровневой системе. Основное уравнение ядерного магнитного резонанса. Понятие химического сдвига в спектроскопии ЯМР, влияние анизотропных групп, единицы измерения, эталоны.</p> <p>Группы эквивалентных ядер, операции симметрии. Магнитно-эквивалентные группы в спектрах ЯМР. Интегральные интенсивности сигналов. Спин-спиновое взаимодействие, системы первого и высших порядков. Факторы, влияющие на значение констант спин-спинового взаимодействия.</p> <p>Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации в спектроскопии ЯМР.</p> <p>2. Влияние химического обмена на спектр ЯМР, «обменивающиеся» протоны при регистрации спектров в полярных растворителях. Приготовление образца для спектроскопии ЯМР, возможные проблемы. Сигналы дейтерированных растворителей, расщепление на квадрупольных ядрах. Принципы импульсной спектроскопии ЯМР, преобразование Фурье в ЯМР. Чувствительность метода ЯМР, способы повышения чувствительности, накопление сигнала, аподизация.</p> <p>4. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса (шкала химических сдвигов ядер ^{13}C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия С–Н) Различные типы гетероядерной развязки при регистрации спектров ЯМР на ядрах ^{13}C. Ядерный эффект Оверхаузера.</p> <p>5. Разностная ЯЭО-спектроскопия, гетероядерный ЯЭО. Действие радиочастотного импульса на систему, понятие фазовой когерентности, 90- и 180-градусные импульсы.</p> <p>6. Понятие о двумерной спектроскопии,</p>	<p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции</p> <p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции</p>

		<p>основные гомоядерные методики: COSY, NOESY, TOCSY. Понятие о двумерной спектроскопии, основные гетероядерные методики: HMQC, HMBC.</p> <p>7. Структурный анализ соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C. Примеры, задачи, упражнения.</p>	<p>Лекции</p> <p>Практ.</p>
5	Основы симметрии молекул и кристаллов	<p>Операции и элементы симметрии. Закрытые элементы симметрии, их взаимодействие. Матрицы преобразований симметрии в двумерном и трехмерном пространстве. Собственные и несобственные вращения, хиральные фигуры.</p> <p>Точечные группы операций симметрии в обозначениях Шенфлиса. Группы низшей категории симметрии. Семейства групп средней категории симметрии, порядки этих групп при одинаковом порядке главной оси n. Группы высшей категории симметрии, их порядки и составляющие элементы. Предельные точечные группы бесконечного порядка.</p> <p>Точечные группы в обозначениях Германа-Могена. Инверсионные оси и их связь с зеркально-поворотными осями системы Шенфлиса. Перевод символов инверсионных осей и точечных групп из одной системы в другую. Орбита точечной группы, кратность орбиты и локальная симметрия ее точек. Симметрически независимая область фигуры.</p> <p>Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка. Элементарная ячейка кристалла, различные способы ее выбора (параллелепипед повторяемости, полиэдр Вороного-Дирихле); параметры ячейки. Обозначения примитивных и центрированных решеток. Фракционные координаты точек, индексы направлений и плоскостей в кристалле произвольной сингонии. Симметрически связанные направления и формы. Матрица Грама. Кристаллографические элементы симметрии в 2D- и 3D-случаях. Сингонии, решетки Браве и кристаллографические точечные группы в двумерном и трехмерном случаях; классы Лауэ. Связь кристаллографического класса со свойствами на примере полярных и хиральных кристаллов.</p> <p>Открытые элементы симметрии, их происхождение, обозначения и действие. Плоскости скользящего отражения; действие плоскостей d и e. Энантиоморфные и неэнантиоморфные винтовые оси. Взаимодействие элементов симметрии порядка 2 с перпендикулярными и наклонными трансляциями. Особенности взаимодействия с</p>	<p>Лекции</p> <p>Практ.</p> <p>Лекции</p> <p>Практ.</p> <p>Лекции</p> <p>Практ.</p>

		<p>участием осей порядка выше 2. Взаимодействие кристаллографических (закрытых и открытых) элементов симметрии.</p> <p>Пространственные группы, их связь с решетками Браве и кристаллографическими классами. Симморфные и несимморфные группы, пары энантиоморфных групп. Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, кратность орбиты. Частные и общие положения в кристалле. Подгруппы пространственных групп. Построение графиков групп триклинной, моноклинной и орторомбической (классы $mm2$, 222, mmm) сингоний, включая центрированные. А- и С-центрировка в классе $mm2$. Стандартная и нестандартные установки. Выбор начала координат в пространственной группе. Определение полного символа группы класса mmm и вывод ее подгрупп по краткому символу.</p>	<p>Лекции Практ.</p>
6	Рентгенодифракционные методы исследования	<p>1. Основы кристаллохимии и рентгеновской дифракции. Фундаментальные понятия и лабораторная техника.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Природа рентгеновского излучения, методы его получения, природа характеристического излучения и «белого излучения» рентгеновской трубки. Природа синхротронного излучения. Методы детектирования рентгеновского излучения (фотопленки, сцинтилляционные счетчики, CCD и Image Plate детекторы. • Понятия об упорядоченных и неупорядоченных фазах. Кристаллы, жидкие и пластические кристаллы, жидкости. Дифракционная картина от различных фаз. • Связь интенсивности дифракции и природы образцов. • Обратное пространство. Уравнение Вульффа-Брэгга, его использование на примере каучука. • Лабораторные дифрактометры. Принципиальная схема и назначение основных частей. • Источники рентгеновского излучения. Рентгеновская оптика. Детекторы рентгеновского излучения. <p>2. Рентгеновская дифракция мелкокристаллических тел и полимеров (порошковая дифракция):</p> <p>Общая характеристика метода. Объекты исследования. Пробоподготовка. Выбор режимов измерения дифрактограммы. Текстура и поглощение. Качественный фазовый анализ. Порошковая база данных ICDD PDF-2. Полиморфизм.</p>	<p>Лекции</p> <p>Лекции, Практ.</p>

		<p>Количественный фазовый анализ. Метод внутреннего стандарта (корундового числа). Метод Ритвельда. Индицирование дифрактограмм. Индицирование кристаллов кубической, тетрагональной и гексагональной сингонии. Определение степени кристалличности полимеров по дифракционным данным. Методы определения величины области когерентного рассеяния (размера кристаллита, ноночастицы). Формула Шерера. Метод Вильямсона-Холла, метод WPPM.</p> <p>3. Монокристалльная рентгеновская дифракция:</p> <p>Общая характеристика метода. Выбор монокристалла. Условия Лауэ и сфера Эвальда. Ряды Фурье. Электронная плотность. Современный монокристалльный эксперимент. Последовательность действий. Сбор отражений. Учет поглощения. Систематические погасания. Индицирование массива данных. Решение и уточнение структуры. Формат выдачи данных. Базы структурных данных. Специальные вопросы рентгеноструктурного анализа. Факторы расходимости и другие критерии характеризующие уточненную структуру. Локализация атомов водорода. Абсолютная конфигурация. Параметры атомных смещений и разупорядочение.</p>	Лекции, Практ.
7	Основы хроматографических методов	<p>1. Общие принципы хроматографии.</p> <p>Основные параметры удерживания в хроматографии и их физический смысл.</p> <p>2. Классификация хроматографических методов.</p> <p>Техника колоночной хроматографии. Химические методы модификации пористых силикагелей для высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Полимерные и углеродные адсорбенты в хроматографии. Колонки с непрерывным (монокристалльным) слоем сорбента.</p> <p>Газовая хроматография. Поликапиллярная газовая хроматография. Хромато-масс-спектрометрия. Хроматография с программированием температуры. Принципы многомерной хроматографии.</p> <p>Принципы градиентной и изократической хроматографии. Принципы обращенно-фазовой и нормально-фазовой ВЭЖХ.</p> <p>Основы ионообменной и ионной хроматографии. Принципы и применение лигандо-</p>	Лекции, Практ.

		<p>обменной хроматографии. Тонкослойная хроматография. Гельпроникающая хроматография.</p> <p>Хроматография в сверхкритическом флюиде. Основы капиллярного электрофореза.</p>	
8	Элементный микроанализ	<p>1. Введение. Элементный анализ как отдельная область исследования веществ и материалов. История возникновения и развития. Работы Прегля, Дюма, Климовой и Коршун. Аппаратурное обеспечение методик количественного определения С, Н, N, О, S, галогенов, металлов и неметаллов. Требования к точности результатов определения.</p> <p>2. Экспресс-гравиметрия (ЭГ). Определение СН, серы, галогенов и золуобразующих элементов. Особенности элементного анализа различных классов ЭОС (производные фтора, бора, кремния, фосфора, ртуть-, осмийорганические соединения и др.) Определение нескольких элементов из одной навески.</p> <p>3. Волюмометрия. Особенности определения азота по Дюма в различных классах ЭОС.</p> <p>4. Титриметрия. Определение галогенов и серы по Шенигеру. Новые варианты метода.</p> <p>5. Методы минерализации. Особенности методов минерализации бор-, фтор-, кремний- и фосфорорганических соединений.</p> <p>6. Спектрофотометрия (СФ). Новые варианты СФ определения бора и фтора из одной навески в веществах с различным атомным соотношением В:F после сжигания по Шенигеру (ионные жидкости, борфторидные комплексы и др.).</p> <p>7. Атомно-абсорбционная и атомно-эмиссионная спектрометрия. Определение натрия и лития методом АЭС в различных объектах после минерализации пробы по Къельдалю. Анализ кремнийорганических полимеров.</p> <p>8. Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА). Качественное и количественное определение</p>	<p>Лекции</p> <p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции</p> <p>Лекции</p> <p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции, Практ.</p> <p>Лекции</p>

		<p>различных элементов от магния до урана в различных матрицах. Анализ порошков, жидкостей, пленок. Источники ошибок в методе РФА. Безнавесочные варианты метода.</p> <p>9. Автоматические методы элементного органического анализа.</p>	Лекции
--	--	---	--------

5. Образовательные технологии

1. В учебном процессе предусмотрено широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий (лекций в диалоговом режиме, компьютерных симуляций, разбора конкретных ситуаций, групповых дискуссий) в сочетании с конкретной научно-исследовательской работой в области химии. В рамках дисциплины предусмотрены мастер-классы специалистов.

2. Сопровождение преподаваемого материала слайдами, подготовленными с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office PowerPoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора. Показ компьютерных моделей химических соединений и их спектров. Демонстрация фильмов, посещение лабораторий.

4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических работ.

5. Необходима самостоятельная работа: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В., Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия: Учеб. М.: Мир, 2003 - 683с.

2. А. Доменикано, И. Харгиттаи – редакторы-составители. Молекулярные структуры, М.: Мир, 1997 - 671 с.
3. Б.К. Вайнштейн, Современная кристаллография, М.: Наука, 1979, Т. 1-4.
4. Л.А. Казицына, Н.Б. Куплетская, Применение ИК, УФ и ЯМР спектроскопии в органической химии, МГУ, 1979 - 238 с.
5. Л. Беллами, ИК-спектры сложных молекул, М.: И.Л., 1963 - 315 с.
6. К. Накамото, ИК и КР спектры неорганических и координационных соединений, под ред. д. х. н. проф. Пентина Ю. А. - М.: Мир. 1991 - 536 с.
7. Р. Фримэн, Магнитный резонанс в химии и медицине, Изд.: Красанд, 2009 - 336 с.
8. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984 - 478 с.
9. Э. Дероум “Современные методы ЯМР для химических исследований”, М.: МИР, 1992 – 401 с.
10. Б.И. Ионин, Б.А. Ершов и А.Т. Кольцов – ЯМР-спектроскопия в органической химии, 1983 - 269 с.
11. Зенкевич И.Г., Иоффе Б.В. Интерпретация масс-спектров органических соединений. Л.: Химия, 1986 - 176 с.
12. Вульфсон Н.С., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектрометрия органических соединений. М.: Химия, 1986 - 311 с.
13. А.Т. Лебедев "Масс-спектрометрия в органической химии". — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003г. - 493 с.
14. И.Э. Нифантьев, П.В. Ивченко Методичка «Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса», химфак МГУ им. М.В. Ломоносова, 2006 г.
15. Количественный анализ хроматографическим методом, под ред. Э. Кэца, пер. с англ., М.: Мир, 1990г.
16. Сычев К.С. Практическое руководство по жидкостной хроматографии. М.: Техносфера, 2010г. - 270 с.
17. Даванков В.А., Навратил Дж., Уолтон Х., Лигандообменная хроматография, пер. с англ., М.: Мир, 1989г. - 290 с.
18. Кирхнер Ю., Тонкослойная хроматография, пер. с англ., т. 1-2, М.: Мир, 1981г.
19. Сверхкритическая флюидная хроматография, под ред. Р. Смита, М.: Мир, 1991г. - 280 с.
20. Методы количественного органического элементного анализа. Под. ред. Н.Э. Гельман. Москва: Химия. 1987 - 294с.
21. В.А. Климова. Основные микрометоды анализа органических соединений. Изд.2-е, доп. Москва: Химия. 1975 - 224с.

б) дополнительная литература:

1. М.А. Ельяшевич, Атомная и молекулярная спектроскопия, М.: Эдиториал УРСС, 2001 г., 896с.

2. Драго Р. Физические методы в химии: В 2 т. М.: Мир, 1981. Т. 1, 2.
3. Э. Штерн. К. Тиммонс, Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии, М.: Мир, 1974 г., 296 с.
4. Р. Сильверстайн, Г. Басслер, Т. Моррил, Спектроскопическая идентификация органических соединений, М.: Мир, 1977 г., 592 с.
5. Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин, Физические методы определения строения органических соединений, М.: Высшая школа, 1984 г., 336 с.
6. Л. Беллами, Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул, М.: Мир, 1971 г., 318 с.
7. А. Смит, Прикладная ИК-спектроскопия, М.: Мир, 1982 г., 328 с.
8. Т. Гилсон, П. Хендра, Лазерная спектроскопия КР в химии, М.: Мир, 1973 г., 308 с.
9. Дж. Граселли, М. Скейвили, Б. Балкин, Применение спектроскопии КР в химии, Мир, 1984 г.
10. К. Джерасси, Дисперсия оптического вращения, М.: ИЛ, 1962г., 398 с.
11. Л. Веллюз, М. Легран, М. Грожан, Оптический круговой дихроизм М.: Мир, 1967г., 318 с.
12. В.В. Дунина, Е.Г. Рухадзе, В.М. Потапов, Получение и исследование оптически активных веществ, М.: Изд-во Моск. ун-та, 1979г., 328 с.
13. H. Gunther - "NMR Spectroscopy", Second Edition, Basic principles, concepts, and application in chemistry, John Wiley & Sons, 1997, 602 p.
14. N.E. Jacobsen, NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology, 2007, PUBLISHER: John Wiley & Sons, Incorporated
15. H. Friebolin - "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy". Fourth, Completely Revised and Updated Edition, Wiley-VCH, 2005
16. Минкин В.И., Осипов О.А., Жданов Ю.А. Дипольные моменты в органической химии. Л.: Химия, 1968г., 246 с.
17. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР: Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981г., 279с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Научная электронная библиотека РФФИ www.elibrary.ru., Информационный ресурс для химиков-синтетиков www.reaxys.com, программа для обработки ЯМР спектров Spinworks (<http://www.spin-works.com>), программа для обработки масс-спектров mMass (<http://www.mmass.org>), программа для просмотра, редактирования, обработки и анализа спектральных данных Spectralworks (<http://www.spectralworks.com>), программа для анализа электронной структуры молекул и спектров Chemissian (www.chemissian.com).

Интернет-ресурсы: Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>, национальный WWW-сервер по химии www.chem.msu.ru, Elementar GmbH

<http://www.elementar.de/en/products/applications/chnos-elemental-analysis/vario-micro-cube/Mitsubishi>; Chemical Analytech AQF-2100
http://www.dins.jp/dins_e/1prdcts/pdf/CAT110204AQF2100H.pdf,
http://www.dins.jp/dins_e/1prdcts/product.htm

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ИСПМ РАН располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом:

- аудитории для проведения лекций, оснащенные компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами;
- В составе имеющегося оборудования:

Рентгеновский дифрактометр D8 Advance для исследования поликристаллов с базой данных PDF (Bruker Analytical X-Ray Systems GmbH, Germany), Германия. 2012 г.; Рентгеновский дифрактометр NANOSTAR для измерений в больших и малых углах дифракции (Bruker Analytical X-Ray Systems GmbH, Germany), Германия. 2008 г.; ЯМР спектрометр Bruker 300 MHz с универсальным датчиком, 2008 г.; Сканирующий микроскоп JSM-5300LV фирмы JEOL 1993 г. Япония. В комплекте с приставкой Link ISIS (1997 г., Oxford, Англия) для рентгеновского микроанализа; Установки (lab-scale) по переработке полимерных материалов. 2000. США, “DACA Instruments”: а). Вытяжная линия (Spinline), б). Литьевая машина (Microinjector), в). Микросмеситель (Microcompounder); ИК Фурье спектрометр Perkin Elmer 1710; ИК-Фурье спектрометр Equinox 55/S. 1998. Германия; ИК-Фурье спектрометр Nicolet 6700, 2012 г.; Лазерный анализатор размера частиц Zetatrac, 2012 г.; Тестер для трибологических измерений, Польша, 2010 тельный переносной прибор для измерения шероховатости, волнистости поверхности MARSURF; Дифференциально-сканирующие калориметры ДСК –500 (г. Самара); Дериватограф С 1985 г. Венгрия; Металлографический микроскоп НЕОФОТ, Германия; Серия панорамных измерителей КСВН, оснащенных резонаторами и рупорными антеннами; Мосты переменного тока ВМ-432, В-602, ВМ-507, ВМ-508, ВМ-484, ВМ-444, цифровой LCR-метр АМ-3001, Fluke РМ 6306 и др.; Источники питания, цифровые измерители тока и напряжения, тераомметры, термостаты для температурного интервала –150 - +250°С; Измерение диэлектрических характеристик полимеров; Установка для измерения сопротивления постоянному току образцов твердых веществ четырехзондовым методом; Установка для регистрации РТЛ полимеров после модернизации. Дифференциально-сканирующие калориметры ДСК –500 (г. Самара); Оптический микроскоп YENAVAL, Карл Цейсс, Германия.

Программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта, утверждённого Приказом Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. N 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)».

Авторы:

д.х.н.,

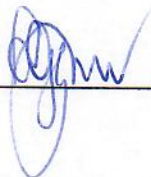


В.Г. Шевченко

Программа принята на заседании Ученого совета ИСПМ РАН
протокол № 12 от 18 июня. 2015 г.

Председатель Ученого совета

член-корр. РАН



А. Н. Озерин