



## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **2.1.1.1. Современные методы химических исследований**

Шифр и наименование группы научных специальностей 1.4. Химические науки

**Шифр и наименование научной специальности 1.4.2. Аналитическая химия**

Форма обучения: очная

Институт математики, естествознания и техники

Кафедра: химико-биологических дисциплин и фармакологии

Трудоёмкость в ЗЕТ - 1

Трудоёмкость в часах - 36

Разработчик(и) рабочей программы: доктор химических наук Н.Я. Мокшина  
Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химико-биологических дисциплин и фармакологии протокол № 1, от 01.09.2022 г

### **Общие положения**

Рабочая программа дисциплины Современные методы химических исследований разработана в соответствии с федеральными государственными требованиями, утвержденными приказом Министерства образования и науки высшего образования Российской Федерации от 20 октября 2021 г. № 951.

## **I. ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ**

**Цель изучения дисциплины:** освоение обучающимися современных научных подходов и методов исследования в химии; формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской работы, углублённого изучения теоретических и методологических основ строения химических веществ и их превращений.

### **Задачи изучения дисциплины:**

- дать знания о методологии химических наук, основных приёмах исследования химических объектов, владения современными информационными технологиями, основ математической статистики для обработки первичных экспериментальных данных;
- сформировать умение применять на практике современные образовательные и информационные технологии, использовать методы наблюдения, классификации химических объектов в профессиональной деятельности.

**Место дисциплины в структуре ОПОП:** реализуется в рамках факультативных дисциплин(модули).

### **Требования к результатам освоения дисциплины**

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

#### **Знать:**

- основные методы научно-исследовательской деятельности,
- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях

- приемы, на основе которых осуществляется критический анализ, оценка и синтез инновационных идей
- основные методологические подходы к проведению научных исследований области химии и смежных наук;
- принципы и методы химического исследования,
- критерии оценки химических исследований.

#### **Уметь:**

- разработать и применить методологические основания исследования;
- составлять программу научного исследования с учетом вклада каждого члена исследовательского коллектива;
- анализировать проведенную исследовательскую работу.

#### **Владеть:**

- современным понятийно-категориальным аппаратом и новейшими методами химического исследования;
- навыками обобщения, анализа, систематизации и критической оценки результатов, полученных отечественными и зарубежными исследователями;
- навыками организации и работы в научном коллективе.

#### **Уметь:**

- выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах,
- критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника,
- управлять информацией (поиск, интерпретация, анализ информации, в т.ч. из множественных источников)
- разработать и применить методологические основания исследования;
- составлять программу научного исследования с учетом вклада каждого члена исследовательского коллектива;
- анализировать проведенную исследовательскую работу.

#### **Владеть:**

- навыками сбора, обработки, критического анализа и систематизации информации по теме исследования,
- навыками выбора методов и средств решения задач исследования,
- навыками управления информацией (поиск, интерпретация, анализ информации, в т.ч. из множественных источников).
- современным понятийно-категориальным аппаратом и новейшими методами химического исследования;
- навыками обобщения, анализа, систематизации и критической оценки результатов, полученных отечественными и зарубежными исследователями;
- навыками организации и работы в научном коллективе.

## **II. СОДЕРЖАНИЕ И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ**

**с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу**

### Очная форма обучения

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего часов	Аудиторные занятия			Сам. раб.
			ЛК	ПЗ	ЛБ	
	<b>Раздел 1. Методы химических исследований</b>	<b>36</b>	<b>18</b>			<b>18</b>
1	Тема 1. Методология и методы в химии	4	2			2
2	Тема 2 Специфические методы изучения свойств и структуры веществ	4	2			2
3	Тема 3 Спектроскопия в изучении веществ	6	3			3
4	Тема 4 Методы исследования оптически активных веществ.	6	3			3
5	Тема 5 Капиллярный электрофорез	6	3			3
6	Тема 6 Качественный анализ химических веществ	4	2			2
7	Тема 7 Количественные методы анализа в химии	6	3			3
	<i>Зачет</i>					
	<i>Всего</i>	<i>36</i>	<i>18</i>			<i>18</i>

### Заочная форма обучения

Не реализуется

### Очно-заочная форма

Не реализуется

## III. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Текущая аттестация проводится в форме контрольной работы (в традиционной форме)

## Вопросы для контрольной работы

1. Методы магнитного резонанса ядер. Спектроскопия ЯМР. Принципы и условия ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов.
2. ЯМР  $^{13}\text{C}$ . ПМР. Применение в структурных исследованиях.
3. Техника и методики спектроскопии ЯМР. Динамический ЯМР. 2ДЯМР. Множественный магнитный резонанс.
4. ЯМР-спектроскопия. Применение метода в фундаментальных и практических исследованиях.
5. Спектроскопия ЭПР. Расщепление спиновых энергетических уровней электрона. Параметры и структура спектров ЭПР. Фактор Ланде.
6. Спектроскопия ЭПР. Взаимодействие электронов и ядер. Сверхтонкая структура спектров ЭПР.
7. Спектроскопия ЭПР. Электрон-электронное взаимодействие. Тонкая структура спектров ЭПР.
8. Применение спектроскопии ЭПР в структурных и кинетических исследованиях.
9. Техника и методики спектроскопии ЭПР. Методы физической поляризации ядерных и электронных спинов. Химическая поляризация ядер и электронов.
10. Спектроскопия ЯКР. Квадрупольные ядра. Электростатическое взаимодействие квадрупольного ядра с электрическим полем.
11. Спектроскопия ЯКР. Квадрупольные уровни энергии и переходы (квантово-механическое представление). Спектры ЯКР.
12. Возможности использования спектроскопии ЯКР в теоретической, квантовой химии и структурных исследованиях.
13. Спектроскопия ЯКР. Техника эксперимента и методические особенности его проведения.
14. Мессбауровская спектроскопия. Теоретические основы метода. Явление ЯГР. Основные условия, необходимые для наблюдения эффекта Мессбауэра. Схемы радиоактивных распадов с образованием мессбауровских атомов.
15. Особенности и параметры мессбауровских спектров. Изомерный сдвиг. Квадрупольное расщепление. Сверхтонкая структура магнитных взаимодействий.
16. Применение ЯГР, техника эксперимента, эмпирические корреляции.
17. Диэлькометрия. Методы определения электрических дипольных моментов молекул. Основные экспериментальные методики (первый метод Дебая, второй метод Дебая, метод молекулярных пучков, метод электрического резонанса).
18. Масс-спектрометрия. Теоретические основы метода. Ионизация атомов и молекул. Методы ионизации.

19. Масс-спектрометрия. Техника и методика эксперимента. Магнитный масс-спектрометр. Динамический масс-спектрометр. Спектрометры ион-циклотронного резонанса.
20. Применение масс-спектрометрии. Хромато-масс-спектрометрия.
21. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация света. Квантово-механическое рассмотрение оптической активности и спиральная модель молекулы.
22. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона. Основные методики эксперимента.
23. Методы исследования оптически активных веществ. Круговой дихроизм. Применение спектрополяриметрии. Основные эмпирические закономерности.
24. Методы исследования оптически активных веществ. Колебательная оптическая активность.
25. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей – метод определения абсолютной конфигурации.
26. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей. Нормальное рассеяние. Закон Фриделя. Рассеяние рентгеновских лучей в области поглощения атома.
27. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности. Рэлеевское рассеяние света. Эффект Керра. Практическое применение рэлеевского рассеяния и эффекта Керра.
28. Магнитный круговой дихроизм и дисперсия магнитного оптического вращения.
29. Капиллярный электрофорез. Физико-химические основы метода. Практическое применение.

Промежуточная аттестация обучающихся осуществляется в форме зачета с использованием следующих оценочных материалов.

### **Вопросы к зачету (3 семестр, очная форма обучения)**

1. Методы магнитного резонанса ядер. Спектроскопия ЯМР. Принципы и условия ЯМР. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов.
2. ЯМР  $^{13}\text{C}$ . ПМР. Применение в структурных исследованиях.
3. Техника и методики спектроскопии ЯМР. Динамический ЯМР. 2ДЯМР. Множественный магнитный резонанс.
4. ЯМР-спектроскопия. Применение метода в фундаментальных и практических исследованиях.
5. Спектроскопия ЭПР. Расщепление спиновых энергетических уровней электрона. Параметры и структура спектров ЭПР. Фактор Ланде.
6. Спектроскопия ЭПР. Взаимодействие электронов и ядер. Сверхтонкая структура спектров ЭПР.
7. Спектроскопия ЭПР. Электрон-электронное взаимодействие. Тонкая структура спектров ЭПР.

8. Применение спектроскопии ЭПР в структурных и кинетических исследованиях.
9. Техника и методики спектроскопии ЭПР. Методы физической поляризации ядерных и электронных спинов. Химическая поляризация ядер и электронов.
10. Спектроскопия ЯКР. Квадрупольные ядра. Электростатическое взаимодействие квадрупольного ядра с электрическим полем.
11. Спектроскопия ЯКР. Квадрупольные уровни энергии и переходы (квантово-механическое представление). Спектры ЯКР.
12. Возможности использования спектроскопии ЯКР в теоретической, квантовой химии и структурных исследованиях.
13. Спектроскопия ЯКР. Техника эксперимента и методические особенности его проведения.
14. Мессбауровская спектроскопия. Теоретические основы метода. Явление ЯГР. Основные условия, необходимые для наблюдения эффекта Мессбауэра. Схемы радиоактивных распадов с образованием мессбауровских атомов.
15. Особенности и параметры мессбауровских спектров. Изомерный сдвиг. Квадрупольное расщепление. Сверхтонкая структура магнитных взаимодействий.
16. Применение ЯГР, техника эксперимента, эмпирические корреляции.
17. Диэлькометрия. Методы определения электрических дипольных моментов молекул. Основные экспериментальные методики (первый метод Дебая, второй метод Дебая, метод молекулярных пучков, метод электрического резонанса).
18. Масс-спектрометрия. Теоретические основы метода. Ионизация атомов и молекул. Методы ионизации.
19. Масс-спектрометрия. Техника и методика эксперимента. Магнитный масс-спектрометр. Динамический масс-спектрометр. Спектрометры ион-циклотронного резонанса.
20. Применение масс-спектрометрии. Хромато-масс-спектрометрия.
21. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация света. Квантово-механическое рассмотрение оптической активности и спиральная модель молекулы.
22. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона. Основные методики эксперимента.
23. Методы исследования оптически активных веществ. Круговой дихроизм. Применение спектрополяриметрии. Основные эмпирические закономерности.
24. Методы исследования оптически активных веществ. Колебательная оптическая активность.
25. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей – метод определения абсолютной конфигурации.
26. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей. Нормальное рассеяние. Закон Фриделя. Рассеяние рентгеновских лучей в области поглощения атома.

27. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности. Рэлеевское рассеяние света. Эффект Керра. Практическое применение рэлеевского рассеяния и эффекта Керра.
28. Магнитный круговой дихроизм и дисперсия магнитного оптического вращения.
29. Капиллярный электрофорез. Физико-химические основы метода. Практическое применение.
30. Цель и задачи методов математического моделирования в химии.
31. Понятие о методе науки, общенаучные и частные методы как способы достижения всестороннего отражения предмета исследования.

#### **IV. ПЕРЕЧЕНЬ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

1. Лупейко, Т.Г. Методологический базис химии. Как решаются научные задачи: учебник с результатами авторских исследований / Т.Г. Лупейко ; Южный федеральный университет, Химический факультет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Южный федеральный университет, 2018. – 447 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=499746> (дата обращения: 1.09.2020). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-9275-2757-1. – Текст : электронный.
2. Булгакова, О.Н. Методы химического анализа : учебное пособие / О.Н. Булгакова, Е.А. Баннова, Н.В. Иванова ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет». - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2015. - 146 с. : схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-8353-1817-9 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=437455> (01.09.2020).
3. Оптическое и лазерно-химическое разделение изотопов в атомарных парах / П.А. Бохан, В.В. Бучано, Д.Э. Закревский и др. – Москва : Физматлит, 2010. – 232 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=69480> (дата обращения: 1.09.2020). – ISBN 978-5-9221-1151-5. – Текст : электронный.

#### **V. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

№ пп	Ссылка на информационный ресурс	Наименование разработки в электронной форме	Доступность
1.	<a href="https://infourok.ru/">https://infourok.ru/</a>	<b>Инфоурок:</b> образовательный интернет-проект России. Включает: презентации,	Свободный доступ



		тесты, видеоуроки и другие материалы по предметам школьной программы.	
2.	<a href="http://edu.ru/">http://edu.ru/</a>	<b>Российское образование: Федеральный портал.</b> Включает ссылки на порталы и сайты образовательных учреждений; государственные образовательные стандарты; нормативные документы; каталог экскурсий и обучающих программ.	Свободный доступ
3.	<a href="http://window.edu.ru/">http://window.edu.ru/</a>	<b>Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"</b> предоставляет свободный доступ к каталогу образовательных интернет-ресурсов и полнотекстовой электронной учебно-методической библиотеке для общего и профессионального образования	Свободный доступ
4.	<a href="https://www.gumer.info/">https://www.gumer.info/</a>	<b>Библиотека Гумер:</b> предоставляет свободный доступ к 5000 книг и статей по гуманитарным наукам	Свободный доступ
5.	<a href="http://fcior.edu.ru/">http://fcior.edu.ru/</a>	<b>Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов (ФЦИОР)</b> предоставляет доступ к электронным образовательным ресурсам и сервисам для всех уровней и ступеней образования.	Свободный доступ

## VI. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1.	<a href="http://www.biblioclub.ru">http://www.biblioclub.ru</a>	Электронно-библиотечная система (ЭБС) Университетская библиотека онлайн	Регистрация через любой университетский компьютер. В дальнейшем предоставляется неограниченный индивидуальный доступ
----	---	--	---

			из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет
2.	<a href="http://www.garant.ru">www.garant.ru</a>	Информационно-правовой портал	Свободный доступ
3.	<a href="http://www.elibrary.ru">www.elibrary.ru</a>	Российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования	Свободный доступ
4.	<a href="http://www.consultant.ru">www.consultant.ru</a>	Российская компьютерная справочно-правовая система	Свободный доступ
5.	<a href="https://data.gov.ru/">https://data.gov.ru/</a>	Портал открытых данных Российской Федерации	Свободный доступ

## **VII. ЛИЦЕНЗИОННОЕ И СВОБОДНО РАСПРОСТРАНЯЕМОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**

При реализации учебной дисциплины применяется следующее лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Windows;
- Microsoft Office;
- LibreOffice

## **VIII. ОБОРУДОВАНИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Учебные занятия проводятся в аудиториях, укомплектованных специализированной мебелью, в том числе стационарными или переносными техническими средствами обучения (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

Самостоятельная работа проводится в кабинетах, оснащенных компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.