

АННОТАЦИЯ

рабочей программы дисциплины

Б1.В.ДВ.1 «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»

Направление подготовки – 04.06.01

Химические науки

Направленность программы аспирантуры Физическая химия

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Кафедра-разработчик ОПОП: «Физической и коллоидной химии»

Кафедра-разработчик рабочей программы: «Физической и коллоидной химии»

1 Цель и задачи дисциплины:

Целями освоения «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии» являются:

- а) формирование знаний о современных теоретических и экспериментальных методах изучения строения молекул и вещества;
- б) обучение технологии получения сведений о строении молекул и вещества на основании экспериментальных и теоретических методов исследования

2 Содержание дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»

Методы изучения строения молекул. Спектральные методы. ЯМР спектроскопия, ЭПР спектроскопия. Рентгеноструктурный анализ. Нейтронография. Возможности и область применения. Методы рефрактометрии и дипольных моментов. Возможности и область применения. Методы неразрушающего контроля для оценки состояния аппаратов химических производств. Квантово-химические расчёты основных характеристик молекул. Возможности и область применения. Элементы квантовой механики. Примеры и приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод Хартри и Хартри – Фока. Переходы между уровнями энергии. Элементы симметрии многоатомных молекул. Разделение электронных и колебательных движений. Симметрии волновых функций. Методы расчета электронных уровней энергии многоатомных молекул. Метод ЛКАО. Приближение невзаимодействующих электронов. Гибридизация. Построение молекулярных орбиталей. Учет электрон - электронных взаимодействий. Метод наложений конфигураций. Метод самосогласованного поля. Свойства силовых постоянных многоатомных молекул. Квантовая теория силовых постоянных. Электронная структура органических молекул и классификация электронных переходов. Закон Ламберта-Берра. Электронные спектры поглощения. Основные характеристики спектральной полосы. УФ-спектроскопия. Структура органических молекул и электронные спектры. Виды колебаний в молекулах. Энергии колебательных переходов. Характеристики полосы поглощения в области основных частот колебаний органических молекул. Примеры структурного анализа по ИК-спектрам. Основные характеристики спектра ЯМР. Химический сдвиг. Константы спин-спинового взаимодействия. Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{13}C . Двумерная спектроскопия ЯМР. Основные принципы метода ЭПР. Регистрация спектров ЭПР. Сверхтонкое расщепление. Анизотропия сверхтонкого взаимодействия. Факторы, определяющие ширину линии ЭПР. Метод спиновой метки. Ионизация вещества. Фрагментация органических молекул при ионизации. Способы ионизации. Анализ химического состава соединений. Использование масс-спектров при структурном анализе. Предмет рентгеноструктурного анализа. Кристаллы. Поликристаллы. Аморфные твердые тела и жидкости. Основные свойства рентгеновских лучей. Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Основной закон ослабления интенсивности рентгеновских лучей. Поглощение и рассеяние рентгеновских лучей. Рентгеновские трубки. Детекторы рентгеновского излучения. Принципы методов рентгеноструктурного анализа. Межплоскостные расстояния и индексы узловых плоскостей. Связь между параметрами решётки, межплоскостными расстояниями и

индексами плоскостей (индексами Миллера-hkl). Квадратичные формы для кристаллов разных сингоний. Дифракция рентгеновских лучей на кристаллической решётке. Уравнение Лауэ. Уравнение Вульфа-Бреггов и его интерпретация. Обратная решётка. Основные свойства обратной решётки. Интерпретация дифракционной картины с помощью сферы Эвальда. Метод порошка. Получение порошковых рентгенограмм. Интерпретация дифракционной картины в терминах обратной решётки. Форма и ширина рентгеновской дифракционной линии. Получение сведений о наборах межплоскостных расстояний. Внешний вид рентгенограмм в зависимости от состояния кристаллитов. Индексирование рентгенограмм. Нахождение формы и величины элементарной ячейки. Вычисление числа структурных единиц в элементарной ячейке. Идентификация веществ по набору межплоскостных расстояний. Факторы, определяющие интенсивность дифракционных отражений. Основы качественного и количественного фазового анализа (РФА). Базы данных для проведения РФА. Методики рентгенофазового анализа. Анализ структуры аморфных и дисперсных веществ. Методы изучения структуры ультрадисперсных систем. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Структурная и дисперсная информация в данных малоуглового рентгеновского рассеяния. Учет электрон - электронных взаимодействий. Метод наложений конфигураций. Метод самосогласованного поля. Определение структурных и дисперсных характеристик наночастиц в образцах по данным малоуглового рентгеновского рассеяния. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).

3 В результате изучения дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии» аспирант должен:

1) Знать:

- а) современные методы исследования строения веществ и материалов, возможности и области применения;
- б) основы квантово-химических расчетов и методы компьютерного моделирования молекулярных структур;
- в) общие принципы оптической спектроскопии в приложении к исследованию строения органических соединений;
- г) основы методов ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса, масс-спектрометрического метода анализа химических веществ;
- д) основные методы рентгеноструктурного анализа.

2) Уметь:

- а) проводить теоретические и экспериментальные исследования структуры и состава веществ и материалов;
- б) анализировать результаты экспериментальных исследований применительно к органическим и неорганическим соединениям и материалам на их основе.

3) Владеть:

- а) основами теоретического и экспериментального исследования молекулярных структур; фазового состава и структуры материалов;
- б) методом компьютерного моделирования строения молекул.

Зав.каф ФКХ
2016 г.

Галяметдинов Ю.Г.