



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»

Химический факультет
Кафедра теоретической и прикладной органической химии
и полимеризационных процессов

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета
 А.И. Вильмс
« 26 »  2022 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Наименование дисциплины (модуля): Б1.В.ДВ.06.01 - Теория и практическое приложение ЭПР

Направление подготовки: 04.03.01. Химия
(код, наименование направления подготовки)



Направленность (профиль) подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очная
(очная, заочная (с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий), очно-заочная (с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий))

Согласовано с УМК химического факультета Рекомендовано кафедрой
теоретической и прикладной органической
химии и полимеризационных процессов

Протокол № 06 от «26» мая 2022г Протокол № 07 от «13» мая 2022 г.

Председатель  Вильмс А.И. Зав. кафедрой  Эдельштейн О.А.

СОДЕРЖАНИЕ

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ	3
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО.....	3
3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.....	3
4. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ	4
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	4
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	5
4.3. Содержание разделов и тем дисциплины	6
4.3.1. Перечень лабораторных работ	8
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	9
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	10
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов).....	11
V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	11
а) основная литература.....	11
б) дополнительная литература	11
в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:.....	11
VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ	12
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	12
6.2. Программное обеспечение:	13
6.3. Технические и электронные средства:	13
VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	13
VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ	15
8.1. Оценочные средства текущего контроля	15
8.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации	16

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель дисциплины – ознакомить студентов с теоретическими основами спектроскопии электронного парамагнитного резонанса, возможностями, областью применения и аппаратурой, привить навыки практического использования метода электронного парамагнитного резонанса для решения фундаментальных и прикладных задач химии.

Задачи дисциплины– в результате изучения данного курса студенты должны познакомиться с теоретическими основами спектроскопии электронного парамагнитного резонанса, освоить основные закономерности регистрации спектров, их связи с электронным строением и агрегатным состоянием вещества, овладеть приемами работы на современном оборудовании.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

1. Учебная дисциплина «Теория и практическое приложение ЭПР» относится к вариативной части программы (курс по выбору).

2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами:

№ п/п	Код дисциплины	Наименование предшествующих дисциплин
1	Б1.О.09	Безопасность жизнедеятельности
2	Б1.О.10	Математика
3	Б1.О.12	Механика и молекулярная физика
4	Б1.О.13	Электричество и магнетизм
5	Б1.О.14	Оптика и строение атома
6	Б1.О.15	Общая химия. Химия неметаллов
7	Б1.О.28	Охрана труда

3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

№ п/п	Код дисциплины	Наименование последующих дисциплин
1	Б1.В.08	Анализ сложных объектов
2	Б1.В.09	Бионеорганическая химия
3	Б1.В.ДВ.04.01	Химия элементоорганических соединений
4	Б1.В.ДВ.05.01	Основы анализа органических соединений
5	Б1.В.ДВ.05.02	Химия металлоорганических соединений

Знание данной дисциплины необходимо при дальнейшем обучении в магистратуре и аспирантуре, а также в сферах профессиональной деятельности: здравоохранение (синтез и контроль качества лекарственных препаратов), химия природного органического сырья (изучение состава и разработка способов переработки и практического использования продуктов из угля, нефти, природного газа) и др.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению 04.03.01 «Химия», профиль: теоретическая и прикладная химия.

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю),
соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ПК-3.Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам.	ИДК ПК-3.3. Проводит расчетно-теоретические исследования по заданным методикам	<u>Знает</u> теорию ЭПР и методики исследования парамагнитных соединений синтетического и природного происхождения. <u>Умеет</u> готовить объекты исследования и проводить их изучение методом ЭПР. <u>Владеет</u> навыками интерпретации спектров ЭПР и компьютерного моделирования по специальным программам.

4. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа, в том числе 40 – контактные часы, 32 – СР.

Форма промежуточной аттестации: зачет.

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
					Лекции	Семинарские (практические занятия)	Консультации, контроль		
1.	Введение.	7			1			1	устный опрос
2.	Магнитный момент свободного атома.	7			1			1	устный опрос
3.	Магнитный резонанс свободного атома с позиций классической механики.	7			1		1	2	устный опрос
4.	Квантово-механическое описание магнитного резонанса свободного атома.	7			1			2	устный опрос
5.	Ионы переходных металлов в электрическом поле лигандов.	7			1			2	устный опрос
6.	<i>d</i> -Орбитали в поле лигандов.	7			1		1	2	устный опрос
7.	Структуры с правильной и искаженной конфигурацией.	7			1			1	устный опрос
8.	Расщепление термов в поле	7			1			2	устный опрос

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися	Самостоятельная		
	лигандов.							
9.	Спин-орбитальное взаимодействие.	7			1		2	устный опрос
10.	Эффекты образования валентных связей и электронно-колебательного взаимодействия.	7			1		2	устный опрос
11.	Угловая зависимость g -фактора.	7		4	1	4	2	устный опрос
12.	Угловая зависимость тонкого взаимодействия.	7			1		1 2	устный опрос
13.	Угловая зависимость сверхтонкого взаимодействия.	7		4	1	4	2	устный опрос
14.	Спектры монокристаллов.	7		2	1	2	2	устный опрос
15.	Спектры поликристаллов и твердых растворов.	7		4	1	4	1 2	устный опрос
16.	Спектры жидких растворов.	7		4	1	4	2	устный опрос
17.	Определение валентного состояния переходного металла.	7			1		1	устный опрос
18.	Исследование строения комплексов Ni(I) в металлокомплексных катализаторах.	7			1		2	устный опрос
	Промежуточная аттестация	7						зачёт
Итого часов			72		18	18	4 32	

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
7	Введение.	Работа с литературой. Выполнение практического задания	1-18 неделя	1	УО	Сараев В.В., Петровский С.К. Электронный парамагнитный резонанс соединений переходных металлов. Учебно-методическое пособие. Часть I. – Иркутск: Изд-
7	Магнитный момент свободного атома.			1	УО	
7	Магнитный резонанс свободного атома с позиций классической механики.			2	УО	
7	Квантово-механическое описание магнитного резонанса свободного атома.			2	УО	

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы во ИГУ. – 2017. – 50 с
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
7	Ионы переходных металлов в электрическом поле лигандов.			2	УО	
7	<i>d</i> -Орбитали в поле лигандов.			2	УО	
7	Структуры с правильной и искаженной конфигурацией.			1	УО	
7	Расщепление термов в поле лигандов.			2	УО	
7	Спин-орбитальное взаимодействие.			2	УО	
7	Эффекты образования валентных связей и электронно-колебательного взаимодействия.			2	УО	
7	Угловая зависимость <i>g</i> -фактора.			2	УО	
7	Угловая зависимость тонкого взаимодействия.			2	УО	
7	Угловая зависимость сверхтонкого взаимодействия.			2	УО	
7	Спектры монокристаллов.			2	УО	
7	Спектры поликристаллов и твердых растворов.			2	УО	
7	Спектры жидких растворов.			2	УО	
7	Определение валентного состояния переходного металла.			1	УО	
7	Исследование строения комплексов Ni(I) в металлокомплексных катализаторах.			2	УО	
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				32		
Из них объем самостоятельной работы с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий (час)				32		

4.3. Содержание разделов и тем дисциплины

Трудоемкость дисциплины (з.е.)	2
--------------------------------	---

<p>Наименование основных разделов (модулей)</p>	<p>Тема 1. <i>Введение.</i> История открытия явления электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Отечественные и зарубежные научные школы развития метода ЭПР в координационной химии.</p> <p>Тема 2. <i>Магнитный момент свободного атома.</i> Орбитальный и спиновый магнитные моменты электрона, и их связь с механическими угловыми моментами. Правила сложения механических и магнитных моментов в многоэлектронных атомах. Фактор спектроскопического расщепления для свободного атома (g-фактор Ланде).</p> <p>Тема 3. <i>Магнитный резонанс свободного атома с позиций классической механики.</i> Прецессия магнитного момента свободного атома в однородном магнитном поле. Частота прецессии Лармора. Взаимодействие магнитного момента с переменным магнитным полем. Явление электронного парамагнитного резонанса.</p> <p>Тема 4. <i>Квантово-механическое описание магнитного резонанса свободного атома.</i> Оператор зеемановского взаимодействия. Свойства операторов углового момента. Символика Дирака для представления собственных функций и интегралов. Правила отбора для переходов между магнитными подуровнями. Условие резонанса для свободного атома.</p> <p>Тема 5. <i>Ионы переходных металлов в электрическом поле лигандов.</i> Влияние электрического поля лигандов на орбитально вырожденные состояния иона. Иерархия взаимодействий в комплексном соединении. Особенности слабого, среднего и сильного кристаллического поля.</p> <p>Тема 6. <i>d-Орбитали в поле лигандов.</i> Расщепление d-орбиталей в поле лигандов кубической симметрии. Угловые части действительных d-функций. Условие существования низкоспиновых и высокоспиновых состояний ионов.</p> <p>Тема 7. <i>Структуры с правильной и искаженной конфигурацией.</i> Теоретико-групповой подход к разложению атомных орбиталей по неприводимым представлениям. Влияние понижения симметрии на одноэлектронные уровни. Особенности тригонального и тетрагонального искажения кубической симметрии.</p> <p>Тема 8. <i>Расщепление термов в поле лигандов.</i> Термы состояний. Правила отнесения состояний многоэлектронных систем к неприводимым представлениям соответствующей точечной группы. Качественная картина расщепления D- и F-термов в кубическом поле лигандов.</p> <p>Тема 9. <i>Спин-орбитальное взаимодействие.</i> Системы с орбитально невырожденным основным состоянием. Влияние спин-орбитального взаимодействия на исходные состояния иона при отсутствии орбитального вырождения. Спин-гамильтониан тонкого взаимодействия. Физический смысл параметров расщепления в нулевом поле. Спин-гамильтониан зеемановского взаимодействия. g-Тензор спектроскопического расщепления. Связь между параметрами расщепления в нулевом поле и g-тензором. Спин-гамильтониан сверхтонкого взаимодействия. Природа анизотропной и изотропной составляющих тензора сверхтонкого взаимодействия.</p> <p>Тема 10. <i>Эффекты образования валентных связей и электронно-колебательного взаимодействия.</i> Ограничения теории кристаллического поля. Дополнительное сверхтонкое взаимодействие с ядрами лигандов. Электронный парамагнитный резонанс в условиях орбитального вырождения основного состояния. Эффект Яна-Теллера.</p>
---	---

	<p>Тема 11. <i>Угловая зависимость g-фактора.</i> Зависимость зеемановского взаимодействия от ориентации магнитного поля по отношению к молекулярной системе координат. Правила отбора в ЭПР при наличии только зеемановского взаимодействия.</p> <p>Тема 12. <i>Угловая зависимость тонкого взаимодействия.</i> Условие резонанса с учетом тонкого взаимодействия в зависимости от ориентации магнитного поля по отношению к молекулярной системе координат. Влияние соотношения между энергиями зеемановского и тонкого взаимодействий на угловую зависимость спектра ЭПР. Особенности спектров ЭПР систем с $S > 1/2$.</p> <p>Тема 13. <i>Угловая зависимость сверхтонкого взаимодействия.</i> Условие резонанса с учетом сверхтонкого взаимодействия в зависимости от ориентации магнитного поля по отношению к молекулярной системе координат. Правила отбора в ЭПР с учетом сверхтонкого взаимодействия.</p> <p>Тема 14. <i>Спектры монокристаллов.</i> g-Тензор и тензор сверхтонкого взаимодействия в лабораторной системе координат. Правила нахождения главных компонентов анизотропных тензоров. Правила нахождения собственных векторов, определяющих связь между лабораторной и молекулярной системами координат.</p> <p>Тема 15. <i>Спектры поликристаллов и твердых растворов.</i> Особенности спектров ЭПР хаотически ориентированных монокристаллических частиц (поликристаллических образцов). Условие существования экстремальных точек на кривой поглощения энергии переменного магнитного поля (характеристические точки). Принцип расчетов формы спектральных линий на ЭВМ.</p> <p>Тема 16. <i>Спектры жидких растворов.</i> Причины усреднения анизотропных параметров ЭПР до их средних значений в жидкой среде. Влияние тонкого взаимодействия на ширину спектральных линий. Правило нахождения числа эквивалентных ядер с минимальной константой СТС.</p> <p>Тема 17. <i>Определение валентного состояния переходного металла.</i> Идентификация ионов первого переходного ряда в жидких и твердых средах: Ti(III), V(IV), V(II), V(0), Cr(V), Cr(III), Cr(I), Fe(III), Fe(I), Co(II), Co(0), Ni(III), Ni(I), Cu(II).</p> <p>Тема 18. <i>Исследование строения комплексов Ni(I) в металлокомплексных катализаторах.</i> Комплексы Ni(I), стабилизированные в растворе Р-, N- и С-донорными лигандами. Влияние эффекта Яна-Теллера на геометрическое и электронное строение комплексов Ni(I). Роль комплексов Ni(I) в процессах превращения ненасыщенных углеводородов.</p>
Формы текущего контроля	устный опрос
Форма промежуточной аттестации	зачёт

4.3.1.Перечень лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	ночн вс	сред	вс ком пете
-------	--------------------------------------	---------------------------------	---------------------	------------	------	-------------------

			Всего часов	Из них практическая подготовка		
1	11	Определение чувствительности и разрешающей способности ЭПР-спектрометра PS-100X	4		Устный опрос	ПК-3
2	13	Определение анизотропных значений g-фактора и констант СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в поликристаллическом порошке соответствующего соединения цинка	4			
3	14, 15	Компьютерное моделирование изотропных и анизотропных спектров ЭПР с использованием программы MMM-FULL	6			
4	16	Определение изотропных значений g-фактора и константы СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в растворе	4			

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1.	Подготовка отчета по лабораторной работе «Определение чувствительности и разрешающей способности ЭПР-спектрометра PS-100X».	Задания см. в «Теория и практическое приложение ЭПР» (методические указания к практикуму).	ПК-3	ИДК ПК-3.3
2.	Подготовка отчета по лабораторной работе «Определение анизотропных значений g-фактора и констант СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в поликристаллическом порошке соответствующего соединения цинка».	Задания см. в «Теория и практическое приложение ЭПР» (методические указания к практикуму).	ПК-3	ИДК ПК-3.3
3.	Подготовка отчета по лабораторной работе «Компьютерное моделирование изотропных и анизотропных спектров ЭПР с использованием программы MMM-FULL».	Задания см. в «Теория и практическое приложение ЭПР» (методические указания к практикуму).	ПК-3	ИДК ПК-3.3
4.	Подготовка отчета по лабораторной работе	Задания см. в «Теория и практическое	ПК-3	ИДК ПК-3.3

	«Определение изотропных значений g-фактора и константы СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в растворе».	приложение ЭПР» (методические указания к практикуму).		
	Подготовка к коллоквиуму по учебной дисциплине «Теория и практическое приложение ЭПР».	См. Оценочные средства текущего контроля.		

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов всех форм и видов обучения является одним из обязательных видов образовательной деятельности, обеспечивающей реализацию требований Федеральных государственных стандартов высшего профессионального образования. Согласно требованиям нормативных документов самостоятельная работа студентов является обязательным компонентом образовательного процесса, так как она обеспечивает закрепление получаемых на лекционных занятиях знаний путем приобретения навыков осмысления и расширения их содержания, навыков решения актуальных проблем формирования общекультурных и профессиональных компетенций, научно-исследовательской деятельности, подготовки к семинарам, лабораторным работам, сдаче зачетов и экзаменов. Самостоятельная работа студентов представляет собой совокупность аудиторных и внеаудиторных занятий и работ. Самостоятельная работа в рамках образовательного процесса в вузе решает следующие задачи:

- закрепление и расширение знаний, умений, полученных студентами во время аудиторных и внеаудиторных занятий, превращение их в стереотипы умственной и физической деятельности;
- приобретение дополнительных знаний и навыков по дисциплинам учебного плана;
- формирование и развитие знаний и навыков, связанных с научно-исследовательской деятельностью;
- развитие ориентации и установки на качественное освоение образовательной программы;
- развитие навыков самоорганизации;
- формирование самостоятельности мышления, способности к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- выработка навыков эффективной самостоятельной профессиональной теоретической, практической и учебно-исследовательской деятельности.

Самостоятельная работа студентов, связанная с подготовкой по закреплению теоретического материала в виде контрольных работ, тестов, устных опросов проводится во внеаудиторное время.

В учебном процессе предусмотрено широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий (семинаров в диалоговом режиме, дискуссий, компьютерных симуляций, разбора конкретных ситуаций, групповых дискуссий) в сочетании с конкретной научно-исследовательской работой в области химии. Одной из основных активных форм обучения, связанных с ведением того вида (видов) деятельности, к которым готовится магистрант (научно-исследовательской и научно-педагогической), является семинар, к работе которого привлекаются ведущие исследователи и специалисты-практики,

В ФБГОУ ВО «ИГУ» организация самостоятельной работы студентов регламентируется Положением о самостоятельной работе студентов, принятым Ученым советом ИГУ 22 июня 2012 г.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (указать при наличии) нет

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

1. Сараев В.В., Петровский С.К. Электронный парамагнитный резонанс соединений переходных металлов. Учебно-методическое пособие. Часть I. – Иркутск: Изд-во ИГУ. – 2017. – 50 с.+

2. Савельев, И. В. Курс общей физики : учебное пособие : в 5 томах / И. В. Савельев. — 5-е изд. — Санкт-Петербург : Лань, 2021 — Том 5 : Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц — 2021. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1211-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/167873> (дата обращения: 12.04.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.+

3. Методы ЭПР и ЯМР в органической и элементоорганической химии : учебное пособие / В. К. Черкзсов, Ю. А. Курский, К. А. Кожанов [и др.]. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2010. — 53 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/152864> (дата обращения: 12.04.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.+

б) дополнительная литература:

1. Абрагам А., Блинн Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. М.: Мир. - 1972. Т. 1. - 651 с.; Т. 2. - 349 с.+

2. Альтшулер С.А., Козырев Б.М. Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп. М.: Наука. - 1972. - 672 с. +

3. Верц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М.: - 1975.- 560 с.+

4. Керрингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир. - 1970. - 447 с.+

5. Ракитин Ю.В., Ларин Г.М., Минин В.В. Интерпретация спектров ЭПР координационных соединений. М.: Наука. - 1993. - 399 с.+

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

<http://elibrary.ru/>

<https://isu.bibliotech.ru/>

<http://rucont.ru/>

<https://e.lanbook.com/>

<https://ibooks.ru/>

<https://www.rsl.ru/>

<http://testfiz.ru/>

http://old.kpfu.ru/f6/bin_files/epr!73.pdf

<http://eprsimulator.org/>

<http://www.easypin.org/>



В соответствии с п. 4.3.4. ФГОС ВО, обучающимся в течение всего периода обучения обеспечен неограниченный доступ (удаленный доступ) к электронно-библиотечным системам:

1. Открытая электронная база ресурсов и исследований «Университетская информационная система РОССИЯ» [Электронный ресурс] : сайт. – Режим доступа: <http://uisrussia.msu.ru> бессрочный
2. Государственная информационная система «Национальная электронная библиотека» [Электронный ресурс] : сайт. – Режим доступа: <http://нэб.рф>. бессрочный
3. Научная электронная библиотека «ELIBRARY.RU» [Электронный ресурс] : сайт. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>. - Контракт № 148 от 23.12.2020 г. Акт от 24.12.2020 г. срок действия по 31.12. 2021 г. доступ: <http://elibrary.ru/>
4. ЭБС «Издательство Лань». Контракт № 100 от 13.11.2020 г. Акт № 671 от 14.11.2020 г.; Срок действия по 13.11.2021 г. доступ: www.e.lanbook.com
5. Контракт № 100 от 13.11.2020 г. Акт № Э 656 от 14.11.2020 г. ; Срок действия по 13.11.2021 г. доступ: www.e.lanbook.com
6. ЭБС ЭЧЗ «Библиотех». Государственный контракт № 019 от 22.02.2011 г. ООО «Библиотех». Лицензионное соглашение к Государственному контракту № 019 от 22.02.2011. Адрес доступа: <https://isu.bibliotech.ru/> Срок действия: бессрочный.
7. ЭБС «Рукопт» Контракт № 98 от 13.11.2020 г.; Акт № БК-5415 от 14.11.20 г. Срок действия по 13.11.2021г. доступ: <http://rucont.ru/>
8. ЭБС «Айбукс.ру/ibooks.ru» Контракт № 99 от 13.11.2020г.; Акт № 99А от 13.11.2020 г. Срок действия по 13.11.2021 г. доступа: <http://ibooks.ru>
9. ООО «Электронное издательство Юрайт». Контракт № 60 от 23.09.2020г. Акт приема-передачи № 3263 от 18.10.2020; Срок действия по 17.10. 2021 г. доступ: <https://urait.ru/> Лицензионный контракт № 04-Е-0258 от 20.09.2021г. Акт приема-передачи № 5684 от 18.10.2021; Срок действия по 17.10. 2022 г. доступ: <https://urait.ru/>
10. ООО «ИВИС», контракт № 157 от 25. 12.2020 г.; Акт от 25.12.2020 г. Срок действия с 01.01.2021 по 31.12.2021 г. доступ: <http://dlib.eastview.com>
11. ООО «ИД «Гребенников», контракт № 147 от 23. 11.2020 г.; Акт от 25.12.2020 г. Срок действия с 01.01.2021 по 31.12.2021 г. доступ: <http://grebennikon.ru>

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Помещения для проведения лекционных и семинарских занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, приборной базой, а именно: - аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 303, 402, 426); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU. - компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 5: Pentium IV – 1 шт.; Pentium III – 1 шт.; Pentium I – 3 шт. Имеется локальная сеть.

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Оборудование.

1. ЭПР-спектрометр CMS-8400.
2. ЭПР-спектрометр PS-100X.
3. Технические электронные весы.
4. Аналитические электронные весы.
5. Два компьютера класса Pentium.

Материалы.

1. Атлас спектров ЭПР комплексов одновалентного никеля.
2. Набор проб с *бис*-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в поликристаллическом порошке соответствующего соединения цинка.
3. Набор проб с *бис*-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в растворах.
4. Методические указания к лабораторным работам по ЭПР.

6.2. Программное обеспечение:

№	Наименование Программного продукта	Кол-во	Обоснование для пользования ПО	Дата выдачи лицензии	Срок действия права пользования
1.	Microsoft Office Professional Plus 2007 Russian Academic OPEN No Level	12	Номер Лицензии Microsoft 46211164 Гос.контракт № 03-162-09 от 01.12.2009	01.12.2009	бессрочно
2.	Microsoft® Windows® Professional 7 Russian Upgrade Academic OPEN No Level Promo	12	Номер Лицензии Microsoft 46211164 Гос.контракт № 03-162-09 от 01.12.2009	01.12.2009	бессрочно
3.	OpenOffice 4.1.3	Условия правообладателя	Условия использования по ссылке: https://www.openoffice.org/licenses/PDL.html	Условия правообладателя	бессрочно

6.3. Технические и электронные средства:

Методической концепцией преподавания предусмотрено использование технических и электронных средств обучения и контроля знаний студентов: мультимедийные презентации.

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины читаются лекции, проводятся практические работы, разбор конкретных ситуаций с использованием пассивных, активных и интерактивных форм обучения. Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют половину от контактной работы, каждый студент выполняет практические работы как индивидуально, так и в составе формируемой преподавателем команды. Такой вид организации обучения способствует приобретению навыков самостоятельного и командного решения различных ситуационных задач, определения и проведения различных этапов научных исследований и работ, представления результатов исследований и формулировки на их основании выводов, Закрепление теоретического материала проводится в виде интерактивного обучения – выполнения практических работ на практических занятиях.

При реализации программы данной дисциплины используются различные образовательные технологии

1.	Разноуровневое обучение	У преподавателя появляется возможность помогать слабому, уделять внимание сильному, реализуется желание сильных учащихся быстрее и глубже продвигаться в образовании. Сильные учащиеся утверждают в своих способностях, слабые получают возможность испытывать учебный успех, повышается уровень мотивации ученья.
2.	Проектные методы обучения	Работа по данной методике дает возможность развивать индивидуальные творческие способности учащихся, более

		осознанно подходить к профессиональному и социальному самоопределению
3.	Исследовательские методы в обучении	Дает возможность учащимся самостоятельно пополнять свои знания, глубоко вникать в изучаемую проблему и предполагать пути ее решения, что важно при формировании мировоззрения. Это важно для определения индивидуальной траектории развития каждого обучающегося
4.	Лекционно-семинарско-зачетная система	Данная система дает возможность сконцентрировать материал в блоки и преподносить его как единое целое, а контроль проводить по предварительной подготовке обучающихся
5.	Информационно-коммуникационные технологии	Изменение и неограниченное обогащение содержания образования, использование интегрированных курсов, доступ в ИНТЕРНЕТ.
6.	Система инновационной оценки «портфолио»	Формирование персонифицированного учета достижений обучающегося как инструмента педагогической поддержки социального самоопределения, определения траектории индивидуального развития личности

Наименование тем занятий с использованием активных форм обучения:

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
11	Подготовка отчета по лабораторной работе «Определение чувствительности и разрешающей способности ЭПР-спектрометра PS-100X».	ПЗ	Защита отчетов	4
22	Подготовка отчета по лабораторной работе «Определение анизотропных значений g-фактора и констант СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в поликристаллическом порошке соответствующего соединения цинка».	ПЗ	Защита отчетов	4
33	Подготовка отчета по лабораторной работе «Компьютерное моделирование изотропных и анизотропных спектров ЭПР с использованием программы MMM-FULL».	ПЗ	Защита отчетов	6
4	Подготовка отчета по лабораторной работе «Определение изотропных значений g-фактора и константы СТВ из спектров ЭПР бис-(диэтилдитиокарбамато)меди(II) в растворе».	ПЗ	Защита отчетов	4
Итого часов				18

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенции ПК-3.

8.1. Оценочные средства текущего контроля

№ п\п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1.	Текущий контроль: устный опрос, презентации	Введение.	ПК-3
2.		Магнитный момент свободного атома.	
3.		Магнитный резонанс свободного атома с позиций классической механики.	
4.		Квантово-механическое описание магнитного резонанса свободного атома.	
5.		Ионы переходных металлов в электрическом поле лигандов.	
6.		<i>d</i> -Орбитали в поле лигандов.	
7.		Структуры с правильной и искаженной конфигурацией.	
8.		Расщепление термов в поле лигандов.	
9.		Спин-орбитальное взаимодействие.	
10.		Эффекты образования валентных связей и электронно-колебательного взаимодействия.	
11.		Угловая зависимость <i>g</i> -фактора.	
12.		Угловая зависимость тонкого взаимодействия.	
13.		Угловая зависимость сверхтонкого взаимодействия.	
14.		Спектры монокристаллов.	
15.		Спектры поликристаллов и твердых растворов.	
16.		Спектры жидких растворов.	
17.		Определение валентного состояния переходного металла.	
18.		Исследование строения комплексов Ni(I) в металлокомплексных катализаторах.	

Собеседование, написание отчёта по выполненным лабораторным работам, коллоквиум.

1. Студенту необходимо выполнить 4 лабораторные работы. Каждая работа оценивается максимум на 3 балла. При выполнении лабораторных работ оценивается техника выполнения, оформление отчетов, включающее обработку экспериментальных данных.

2. Предусмотрено собеседование по теоретическому материалу в виде коллоквиумов. Каждая тема оценивается максимум на 3 балла.

Перечень вопросов к коллоквиуму

1. Спиновые механические и магнитные моменты электрона, связь между ними.
2. Эффект Зеемана. Классическое и квантово-механическое описание эффекта.
3. Условие резонанса. Связь между частотой прецессии и энергией кванта поглощения.
4. Энергетические уровни ионов переходных групп в модели кристаллического поля.
5. Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор. Связь анизотропии g-фактора с геометрией окружения парамагнитного центра.
6. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Спин-гамильтониан сверхтонкого взаимодействия.
7. Природа тонкого взаимодействия. Константы расщепления в нулевом поле. Спин-гамильтониан тонкого взаимодействия.
8. Влияние агрегатного состояния вещества на спектры ЭПР. Особенности спектров ЭПР поликристаллических образцов.
9. Принципы компьютерного моделирования спектров ЭПР поликристаллических образцов.

8.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации

1. Спиновые механические и магнитные моменты электрона, связь между ними.
2. Эффект Зеемана. Классическое и квантово-механическое описание эффекта.
3. Условие резонанса. Связь между частотой прецессии и энергией кванта поглощения.
4. Энергетические уровни ионов переходных групп в модели кристаллического поля.
5. Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор. Связь анизотропии g-фактора с геометрией окружения парамагнитного центра.
6. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Спин-гамильтониан сверхтонкого взаимодействия.
7. Природа тонкого взаимодействия. Константы расщепления в нулевом поле. Спин-гамильтониан тонкого взаимодействия.
8. Влияние агрегатного состояния вещества на спектры ЭПР. Особенности спектров ЭПР поликристаллических образцов.
9. Принципы компьютерного моделирования спектров ЭПР поликристаллических образцов.

Оценка «зачтено», если студент на все вопросы дает правильные и полные ответы самостоятельно, или с небольшой помощью преподавателя;

Оценка «не зачтено», если студент на все вопросы дает неправильные ответы или не дает вовсе.

Разработчики:



(подпись)

профессор

(занимаемая должность)

Сараев В.В.

(инициалы, фамилия)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 Химия.

Программа рассмотрена на заседании кафедры теоретической и прикладной органической химии и полимеризационных процессов

Протокол № 07 от «13» мая 2022__ г.

Зав. кафедрой



Эдельштейн О.А.

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы