



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Иркутский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета
/Вильмс А.И./
«15» марта 2019 г.

Рабочая программа дисциплины

Индекс дисциплины по УП: **ФТД.2**

Наименование дисциплины: **Ядерно-физические методы анализа
природного органического сырья**

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре:
04.06.01 - Химические науки

Направленность программы подготовки научно-педагогических кадров в
аспирантуре: **Физическая химия**

Форма обучения **очная / заочная**

Согласовано с УМК химического
факультета
протокол № 9 от «11» 03 2019 г.
Председатель УМК В.И. Вильмс А.И./

Программа рассмотрена на заседании
кафедры физической и коллоидной химии
«01» 03 2019 г. Протокол № 7
Зав. кафедрой А.Ф. Шмидт /

Иркутск 2019 г.

Содержание

стр.

1. Цели и задачи дисциплины.	3	
2. Место дисциплины в структуре ООП.	3	
3. Требования к результатам освоения дисциплины.		4
4. Объем дисциплины и виды учебной работы.		5
5. Содержание дисциплины.	6	
5.1 Содержание разделов и тем дисциплины.		7
5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами.		7
5.3 Разделы и темы дисциплин и виды занятий.		
6. Перечень вопросов и заданий для самостоятельной подготовки.		8
7. Примерная тематика курсовых проектов		
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:		10
а) федеральные законы и нормативные документы;		
б) основная литература;	10	
в) дополнительная литература;	10	
г) программное обеспечение;	10	
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы		
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.		11
10. Образовательные технологии.	11	
11. Оценочные средства. (ОС).	11	

1. Цели и задачи дисциплины:

ЦЕЛЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель дисциплины – дать аспирантам - химикам представление о принципах и практическом применении основных широко востребованных в настоящее время ядерно-физических методов анализа в химии. Достоинство курса состоит в том, что рассматривается комплексное применение спектроскопических и спектральных методов для установления состава, строения, структуры органических и неорганических соединений. Курс состоит из последовательно и логически связанных разделов, посвященных ядерно-физическим методам анализа (ЯМР, ЭПР, Нейтрон-активационного анализа, Месс-Бауровской спектроскопии (метод ядерного гамма-резонанса), акустического ядерного магнитного резонанса, химическая поляризация ядер).

ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ.

В результате изучения данного курса аспиранты должны: знать теорию, позволяющую описывать физические явления, которые послужили основой возникновения физического метода, принцип и устройство оборудования для наблюдения физического явления, параметры оборудования и характеристики каждого из методов, возможности и ограничения методов, способ приготовления образцов для анализа, а так же применение методов к решению практических задач по общему направлению « состав – строение – структура» с широкими возможностями идентификационного потенциала (каталоги, диаграммы, банки данных, компьютерное моделирование).

2. Место дисциплины в структуре ООП:

Современная физическая химия базируется на арсенале физических методов, который настолько обширен, а применение их настолько разнообразно, что требуется систематизация теоретических принципов, рассмотрение вопросов технического воплощения каждого из физических методов анализа, а главное получение устойчивых навыков практического применения для решения конкретных задач. В курсе «Ядерно-физические методы анализа» физические методы классифицированы как по характеру взаимодействия вещества с излучением (поток частиц) так и по тем свойствам вещества, которые могут этими методами определяться. Первый, связан с методами оптической, радиоспектроскопии, ионизационными методами и занимает доминирующее положение в курсе «Физические методы анализа».

Дисциплина «Ядерно-физические методы анализа» включена в факультативные дисциплины учебного плана. Для освоения дисциплины аспиранты используют знания, умения, практические навыки, способы деятельности и установки, сформированные в ходе изучения предметов « Физические методы исследований», «Строение вещества», «Физика». Освоение дисциплины "Ядерно-физические методы анализа " является необходимой основой для последующего углублённого изучения дисциплин по учебному плану - курсов по выбору аспирантов, для выполнения диссертационной работы.

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Аспирант должен обладать следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- знать основные приемы и методы получения веществ, методы их идентификации, определения структуры и свойств с помощью уникального и серийного научного оборудования (ПК-1);
- - использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентаций результатов диссертационной работы (ПК-3).

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: теорию, описывающую физические явления, которые послужили основой возникновения физического метода, принцип и устройство оборудования для наблюдения физического явления, параметры оборудования и характеристики каждого из методов, возможности и ограничения методов, способ приготовления образцов для анализа, а также применение методов к решению практических задач по общему направлению» состав-строение-структура с широкими возможностями идентификационного потенциала.

Уметь: интерпретировать результаты физико-химических методов исследования, пользоваться справочной электронной базой данных с целью решения задачи «состав-строение – структура», подготовить отчет о выполненной работе.

Владеть: основами техники выполнения основных аналитических операций при регистрации спектров различными физическими методами анализа исследуемых веществ; навыками корпоративного мышления и коммуникативных компетенций при выполнении научно-исследовательской и научно-вспомогательной профессиональной деятельности.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы (очное обучение)

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Курсы			
		1	2	3	4
Аудиторные занятия (всего)	24/0,66		24		
В том числе:	-		-	-	-
Лекции	12/0,33		12		
Практические занятия (ПЗ)	12/0,33		12		
Семинары (С)	-		-		
Лабораторные работы (ЛР)	-		-		
Контактная работа	24/0,66		24		
Самостоятельная работа (всего)	48/1,3		48		
<i>Контроль самостоятельной работы</i>					
Зачет с оценкой					
Общая трудоемкость	часы	72	72		
	зачетные единицы	2	2		

Объем дисциплины и виды учебной работы (заочное обучение)

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Курсы			
		1	2	3	4
Аудиторные занятия (всего)	16/0,44		16		
В том числе:	-		-	-	-
Лекции	10/0,27		10		
Практические занятия (ПЗ)	6/0,16		6		
Семинары (С)	-		-		
Лабораторные работы (ЛР)	-		-		
Контактная работа	16/0,44		16		
Самостоятельная работа (всего)	56/1,5		56		
<i>Контроль самостоятельной работы</i>					
Зачет с оценкой					
Общая трудоемкость	часы	72	72		
	зачетные единицы	2	2		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов и тем дисциплины

ВВЕДЕНИЕ (1 ч.)

Физические методы в химии – место, задачи, цели. Типы и специфика задач, решаемых физическими методами исследования. Универсальные физические методы исследования. Основные направления применения физических методов исследования при анализе сложных объектов. Прямая и обратная задача физических методов исследования. Некорректность постановки обратных задач. Общие черты спектроскопических методов. Схема рассмотрения физических методов исследования – физический принцип, аппаратное решение, измеряемые параметры, интерпретация параметров для химических задач, основные особенности, достоинства и недостатки. (ПК-1)

5.1.1 Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (1 ч.)

Квантово механическая модель изолированного протона. Экспериментальное подтверждение квантования углового момента и уравнение резонанса. Эксперименты по ядерному магнитному резонансу в конденсированной среде и принципы устройства современного спектрометра ЯМР. Магнитные свойства различных ядер. Чувствительность метода. Населенность уровней. Интенсивность сигналов. Внутренние и внешние стандарты. Параметры спектров ядерного магнитного резонанса. Спектры протонного магнитного резонанса молекул. Константа экранирования ядра. Понятие химического сдвига в спектрах ядерного магнитного резонанса. Единицы измерения. Интегрирование резонансного сигнала. Зависимость резонансной частоты от структуры. Факторы, определяющие протонные химические сдвиги. Магнитная анизотропия. Эффект

электрических полей полярных групп. Спектры ЯМР ядер углерода и ядер со значением спина больше $\frac{1}{2}$. Параметры спектров ЯМР ядер ^{13}C . Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов. Правила интерпретации тонкой структуры спектра. Классификация спин-спиновых взаимодействий. Спин-спиновое взаимодействие и химическое строение. Релаксация ядер. Принципы определения релаксационных характеристик ядер. Связь релаксации ядер с химическим строением молекул органических и неорганических веществ. Спектроскопия ЯМР и строение органических соединений. (ПК-1)

5.1.2 Спектроскопия электронно-парамагнитного резонанса (4 ч.)

Природа парамагнетизма. Типы радикалов. Орбитальный и спиновый магнетизм. g – фактор. Снятие орбитального вырождения. Анизотропия g – фактора. Спин-орбитальное взаимодействие. Парамагнитные частицы в магнитном поле. Условия ЭПР. Заселенность уровней. Спин-решеточная и спин-спиновая релаксация. Точность, чувствительность метода. Ширина спектральной линии в спектре ЭПР, причины уширения. Сверхтонкая структура (СТС) в спектре ЭПР. СТС от одного и нескольких парамагнитных ядер. Число компонентов мультиплетов, распределение интенсивностей. Вид спектров ЭПР простейших радикалов. Идентификация парамагнитных частиц по спектрам ЭПР. Анизотропные и изотропные константы СТС. Особенности эксперимента ЭПР, характер образцов, используемые растворители. Приложение метода ЭПР в химии. Использование «спиновых меток». (ПК-1)

5.1.3 Ядерный квадрупольный резонанс (4 ч.)

Осевая квадруполь. Квадрупольный момент ядра. Взаимодействие зарядов, диполей и квадрупольей с плотностью отрицательного заряда. Градиент электрического поля. Аксиальная симметрия поля, параметр ассиметрии. Причины появления на ядре атома неоднородного электрического поля. Энергия взаимодействия электрического квадрупольного момента ядра с аксиально симметричным градиентом. Квадрупольные уровни энергии, энергии перехода. Правило отбора. Энергия взаимодействия, частота перехода и правило отбора при отсутствии аксиальной симметрии. Особенности эксперимента ЯКР. Мультиплетность спектров ЯКР и эффекты ее обуславливающие. Влияние магнитного поля на спектры. Применение ЯКР в химии. (ПК-1)

5.1.4 Ядерно – физические методы (1 ч.)

Деление ядер. Искусственные и природные изотопы. Радиоактивные изотопы. Частицы радиоактивного распада. Понятие флуоресценции и фосфоресценции. (ПК-1)

5.1.5 Метод ядерного гамма-резонанса (мессбауровская спектроскопия) (3 ч.)

Энергия испускаемых гамма-квантов. Доплеровский сдвиг. Энергия отдачи. Доплеровское уширение. Распределение энергии испущенных и поглощенных γ - квантов. Энергия γ - квантов, вызывающая переход в образце. Вероятность переходов и метод ее повышения. Мессбауровский спектр. Химические сдвиги (центровые, изомерные). Квадрупольные и магнитные взаимодействия. Применение мессбауровской спектроскопии для решения химических задач. Принципы дифракционной мессбауровской спектроскопии.

Чувствительность нейтрон-активационного анализа. Квадрупольное взаимодействие в спектрах ядерного-гамма резонанса. (ПК-1)

5.1.6 Нейтронно-активационный анализ (1 ч.)

Энергия тепловых нейтронов. Время полураспада радиоактивных элементов. Способы активации образца. Блок-схема прибора. Достоинства и недостатки нейтронно-активационного анализа (чувствительность, точность, воспроизводимость), Предел обнаружения элементов. Количественный анализ. Способы эталонирования. Примеры анализа веществ методом нейтронно-активационного анализа. Чувствительность нейтрон-активационного анализа для различных элементов. Изотопное разбавление. Сечение нейтронного захвата. Активация другими частицами. (ПК-1)

5.1.7 Акустический ядерный магнитный резонанс (1 ч.)

Природа резонансного поглощения фононов. Способы наблюдения. Акустические энергетические переходы. Скин-эффект. Однофоновые процессы. Механизм однофоновых процессов. Чувствительность метода. Примеры применения в химии. (ПК-1)

5.1.8 Химическая поляризация ядер (2 ч.)

Динамика молекулярных движений в растворах и рекомбинация радикалов без учета их спина. Природа спиновых и магнитных моментов. Статистика контактов радикалов в растворах. Рекомбинация радикалов. Теория ХПЯ в сильных и слабых магнитных полях. Магнитный изотопный эффект. (ПК-1)

5.3. Разделы и темы дисциплины и виды занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных ед., 72 часов

№	НАИМЕНОВАНИЕ ТЕМ	Всего час.	Виды подготовки		СРС
			лекции	практич. занятия	
1	Введение	6/	1/1	1/0	4/5
2	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.	12	2/2	2/1	8/9
3	Ядерный квадрупольный резонанс.	12	2/2	2/1	8/9
4	Ядерно – физические методы.	12	2/1	2/1	8/10
5	Метод ядерного гамма-резонанса (месбауровская спектроскопия).	12	2/1	2/1	8/10
6	Нейтронно-активационный анализ.	6	1/1	1/1	4/4
7	Акустический ядерный магнитный резонанс.	6	1/1	1/1	4/4
8	Химическая поляризация ядер.	6	1/1	1/0	4/5
	ИТОГО	72/72	12/10	12/6	48/56

5.4. Перечень практических занятий

№ п/п	№ темы дисциплины	Наименование практических работ	Трудо-емкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
	Введение	ВВЕДЕНИЕ	1/0	устное собеседование	ПК-1
2	5.1.1	СПЕКТРОСКОПИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА	2/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
3	5.1.2	ЯДЕРНЫЙ КВАДРУПОЛЬНЫЙ РЕЗОНАНС	2/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
	5.1.3	ЯДЕРНО – ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ	2/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
4	5.1.4.	МЕТОД ЯДЕРНОГО ГАММА-РЕЗОНАНСА (МЕССБАУРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ)	2/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
5	5.1.6	НЕЙТРОННО-АКТИВАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ	1/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
6	5.1.7	АКУСТИЧЕСКИЙ ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС	1/1	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3
7	5.1.8	ХИМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЯДЕР	1/0	решение задач по конкретным спектрам	ПК-1,3

7. Курсовые работы – не предусмотрены

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

ЛИТЕРАТУРА

а) основная

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир 2003.
2. Пентин Ю.А. Курамшишина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. – М.: Мир. 2008, 308 с.
3. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1-2. – М.: Мир. 1981, 422 с.

б) дополнительная:

1. Бучаченко А.Л. Химическая поляризация электронов и ядер «Наука», 1974. – 245 с.
2. Бучаченко А.Л., Р.З.Сагдеев, К.М.Салихов Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск : «Наука», . – 285 с.
3. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия. М. : МГУ, 1980. . – 272 с.

4. Семин Г.К., Бабушкина Т.А. Якобсон Г.Г. Применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л. Химия. 1972. . – 536 с.
5. Х. Гюнтер Введение в курс спектроскопии ЯМР М. Мир, 1984. – 478с.
6. Э.Дероум Современные методы ЯМР для химических исследований. – М. Мир, 1992. . – 401 с.
7. Э. Преч, Ф.Бюльман, К.Аффольтер Определение строения органических соединений. М. «Мир», 2006. . – 320 с.

Сетевой ресурс:

<http://library.books27x7.com>

<http://www2.viniti.ru>

<http://elibrary.ru>

<https://www.reaxys.com>

<http://www.info.reaxys.com>

<http://www.Lbz.ru>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Материалы и оборудование Спектрометр ядерного-магнитного резонанса VXR-500S «Varian», снабженный датчиками для регистрации всех магнитно-активных ядер. Пакет программ для моделирования спектров ЯМР и расчета структурных формул.

Материалы: набор стандартных образцов для наблюдения явления ядерного-магнитного резонанса и химической поляризации ядер.

10. Образовательные технологии:

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения: технология объяснительно-иллюстративного объяснений с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, разбор конкретных ситуаций, решение ситуационных задач.

11. Оценочные средства (ОС)

11.1. Программируемые опросы на лекциях, контрольные задачи для самопроверки.

11.2. *Оценочные средства текущего контроля:* решение задач по конкретным спектрам, полученными различными физическими методами анализа с установлением состава, строения и структуры неизвестного соединения. Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность компетенций – ПК-1, ПК-3.

11.3 Формой итогового контроля является *зачет* с оценкой.

Тематика заданий для самостоятельной работы

1. Основные параметры спектров ЯМР на ядрах с магнитным моментом неравным нулю. Установление структуры соединений имеющих эквивалентные и неэквивалентные ядра. Диапазон изменений химических сдвигов различных ядер. Спектроскопия ЯМР в одно и двумерном представлении. *Решение задач*
2. Факторы определяющие основные закономерности изменения спектральных параметров в условиях их неэквивалентности. *Решение задач*
3. Основные закономерности изменения параметров спектров ЭПР. Факторы их определяющие. *Решение задач*
4. Спектроскопия ЯМР C-13, как основной метод установления структуры сложных органических соединений. *Решение задач*
5. Основные закономерности изменения параметров спектров ядерного гамма-резонанса. Факторы, определяющие их изменения. *Решение задач*
6. Основные принципы и особенности метода ядерного гамма-резонанса и нейтронно-активационного метода *Решение задач*
7. Особенности и принципиальные возможности химической поляризации ядер и электронов на примере спектров ХПЯ алкилгалогенидов. Принципы анализа спектров ЯМР и ЭПР.
8. Отличительные особенности акустического ядерного магнитного резонанса. Природа резонансного поглощения фононов. Способы наблюдения. Акустические энергетические переходы. Скин-эффект. Однофоновые процессы. Механизм однофоновых процессов. Чувствительность метода. Примеры применения в химии.

Примерный перечень вопросов к зачету

Причины, определяющие интенсивность сигналов в спектрах ЯМР, ЭПР, ЯКР, Месс-Бауровской спектроскопии. Причины неоднородности электрического потенциала на ядре, уровни энергии и частоты ЯКР. Понятие химического сдвига в спектрах ядерного магнитного резонанса. Единицы измерения. Интегрирование резонансного сигнала. Зависимость резонансной частоты от структуры. Факторы, определяющие протонные химические сдвиги. Магнитная анизотропия. Эффект электрических полей полярных групп. Спектры ЯМР ядер углерода и ядер со значением спина больше $\frac{1}{2}$. Спин-гамильтониан зеемановского взаимодействия. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Спин-гамильтониан сверхтонкого взаимодействия. Природа тонкого взаимодействия. Константы расщепления в нулевом поле. Спин-гамильтониан тонкого взаимодействия. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов. Правила интерпретации тонкой структуры спектра. Классификация спин-спиновых взаимодействий. Спин- спиновое взаимодействие и химическое строение. Релаксация ядер. Принципы определения релаксационных характеристик ядер. Связь релаксации ядер с химическим строением молекул органических и неорганических веществ. Спиновые механические и магнитные моменты электрона, связь между ними. Эффект Зеемана. Условие резонанса. Спин-орбитальное взаимодействие и g- фактор. Связь анизотропии g- фактора с геометрией окружения парамагнитного центра. Энергия тепловых нейтронов. Время полураспада радиоактивных элементов. Способы активации образца. Блок-схема прибора. Достоинства и недостатки нейтронно-активационного анализа

(чувствительность, точность, воспроизводимость). Предел обнаружения элементов. Количественный анализ. Энергия испускаемых гамма-квантов. Доплеровский сдвиг. Энергия отдачи. Доплеровское уширение. Распределение энергии испущенных и поглощенных γ - квантов. Энергия γ - квантов, вызывающая переход в образце. Вероятность переходов и метод ее повышения. Мессбауровский спектр. Химические сдвиги (центровые, центровые). Квадрупольные и магнитные взаимодействия. Применение Мессбауровской спектроскопии для решения химических задач.

Разработчик:

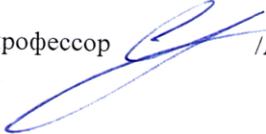
д-р хим. наук, профессор



А.Г. Пройдаков

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
« 01 » 03 2019 г. Протокол № 7

Зав. кафедрой д-р хим. наук, профессор



/А.Ф. Шмидт /

ЛИСТ ОБНОВЛЕНИЯ

Дата	Внесенные обновления	Подпись автора	Подпись зав. кафедрой