

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талорский Д.А.

ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(ДО КФУ)

_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования Б1.В.ОД.4

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Верещагина Я.А.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 7134217

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Верещагина Я.А.
Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова ,
Jana.Vereschagina@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Преподавание дисциплины "Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования" ставит своей главной целью раскрыть смысл основных законов оптики и электромагнетизма, сформировать основные представления о полярности, поляризуемости химических соединений и о конформационных характеристиках молекул, научить студента понимать принципы конформационного анализа органических и элементоорганических соединений, представлять возможности и перспективы методов определения дипольных моментов, методов изучения поляризуемости и магнитной оптической активности веществ.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования" включена в раздел "Б1.В.ОД.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр. Для успешного освоения дисциплины студент должен знать фундаментальные основы математики, физики, химии (неорганическая, органическая, физическая, аналитическая).

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Должен обладать способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу.
ОК-3 (общекультурные компетенции)	Должен обладать готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала.
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	Должен обладать способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач.
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии.

В результате освоения дисциплины студент:

4. должен продемонстрировать способность и готовность:

Понимать основные принципы использования электрических и электрооптических методов в различных областях химии.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Теоретические основы электрических и оптических методов исследования	2	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Методы определения электрических дипольных моментов молекул	2	2-5	2	6	0	
3.	Тема 3. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности	2	6-8	2	4	0	
4.	Тема 4. Конформационный анализ органических и элементоорганических соединений	2	9-13	2	8	0	
5.	Тема 5. Применение и перспективы развития электрических, электро- и магнитооптических методов исследования	2	14	2	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Зачет
	Итого			10	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Теоретические основы электрических и оптических методов исследования

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные понятия и термины. Предмет дисциплины. Задачи дисциплины. Электрические методы: электрический дипольный момент молекулы. Энергия молекулы во внешнем электрическом поле. Ориентационная поляризация молекулы. Эффект Штарка и квантово-механический подход к выводу ориентационной поляризации. Диэлектрик в электрическом поле. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона. Теория методов изучения поляризуемости и магнитной оптической активности. Релеевское рассеяние света в газах и растворах. Явление Фарадея, теория эффекта. Эффект Коттона-Мутона.

Тема 2. Методы определения электрических дипольных моментов молекул

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Первый метод Дебая ? определение электрического дипольного момента молекул в газовой фазе. Второй метод Дебая ? определение электрического дипольного момента молекул веществ в разбавленных растворах. Достоинства и ограничения методов Дебая. Отклонение молекулярного пучка в неоднородном электрическом поле. Смещение пучка в неоднородном магнитном и электрическом поле. Метод электрического резонанса. Принцип построения траектории частиц (И. Раби).

практическое занятие (6 часа(ов)):

Экспериментальные методики и применение данных по электрическим дипольным моментам в химии. Экспериментальное определение диэлектрической проницаемости растворов полярных веществ в неполярных растворителях. Диэлькометрия, аппаратное оформление. Уравнение Дебая, формула Гуггенгейма-Смита. Расчет ориентационной поляризации и экспериментального дипольного момента вещества. Векторно-аддитивная схема для вычисления дипольных моментов веществ. Принципы симметрии, регулярные и нерегулярные группы. Различные аддитивные схемы. Установление химического строения вещества на основе аддитивной схемы. Изучение взаимного влияния атомов в молекуле как отклонение от аддитивности.

Тема 3. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Закон Керра. Теория эффекта Керра. Константы Керра и свойства молекулы. Метод релеевского рассеяния света. Явление Фарадея и связь с эффектом Зеемана. Квантово-механическое объяснение эффекта Зеемана. Магнитный круговой дихроизм и дисперсия магнитного оптического вращения.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Схема и условия эксперимента релеевского рассеяния света. Методика эксперимента (изучение эффекта Керра). Применение метода релеевского рассеяния света и эффекта Керра. Определение главных значений эллипсоида поляризуемости молекул. Определение главных значений эллипсоида поляризуемости химической связи и группы атомов. Изучение внутреннего вращения молекул.

Тема 4. Конформационный анализ органических и элементоорганических соединений

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Общие понятия и принципы конформационного анализа. Предмет конформационного анализа. Конформационная номенклатура. Конформационно-подвижные системы. Внутреннее вращение и термодинамические функции. Поворотные-изомерное приближение. Конформационные силы: торсионные барьеры, универсальные внутримолекулярные взаимодействия, специфические взаимодействия. Конформационные эффекты. Взаимодействия вращающихся групп. Влияние внешних условий на конформации молекул. Конформационный анализ и реакционная способность химических веществ.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Конформационные характеристики органических и элементоорганических молекул и методы их определения. Дифракционные методы: рентгеноструктурный анализ, газовая электронография. Аддитивные методы: дипольные моменты, эффект Керра. Спектроскопические методы: вращательная, колебательная, ИК, ФЭС и ЯМР спектроскопия. Принципы решения сложных конформационных задач. Методы поэтапно-пофрагментного подхода. Методы ?взаимозависимой информации?. Совместное определение пространственного и электронного строения молекул. Методы квантовой химии в конформационном анализе. Экспериментальный и теоретический конформационный анализ органических и элементоорганических соединений с использованием физических методов исследования и квантово-химических расчетов; исследование полярности, пространственного и электронного строения молекул.

Тема 5. Применение и перспективы развития электрических, электро- и магнитооптических методов исследования

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования в химии, развитие учения о внутреннем вращении и поворотной изомерии, химической связи, механизме химических реакций. Интеграция различных физических методов в решении сложных задач в различных областях наук. Применение электрических, электро- и магнитооптических методов исследования в промышленной практике: методы тестирования органических веществ, продуктов нефтехимии, топлив.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Теоретические основы электрических и оптических методов исследования	2	1	Подготовка к опросу. Работа с учебной литературой и лекционным материалом.	4	Устный опрос
2.	Тема 2. Методы определения электрических дипольных моментов молекул	2	2-5	Подготовка к опросу. Работа с учебной литературой и лекционным материалом. Подготовка к контрольной	10	Устный опрос. Контрольная работа.
3.	Тема 3. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности	2	6-8	Подготовка к опросу. Работа с учебной литературой и лекционным материалом.	8	Устный опрос.
4.	Тема 4. Конформационный анализ органических и элементоорганических соединений	2	9-13	Подготовка к опросу. Работа с учебной литературой и лекционным материалом. Контрольная работа.	18	Устный опрос. Контрольная работа.

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Применение и перспективы развития электрических, электро- и магнитооптических методов исследования	2	14	Подготовка к опросу. Работа с учебной литературой и лекционным материалом.	4	Устный опрос.
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При изучении дисциплины "Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования" используется балльно-рейтинговая система; предусматривается разбор и анализ конкретных ситуаций, основанных на практических примерах, использование компьютерных симуляций, выполняются практические работы на диэлькометрическом оборудовании.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение. Теоретические основы электрических и оптических методов исследования

Устный опрос, примерные вопросы:

Роль физических методов в химии.

Тема 2. Методы определения электрических дипольных моментов молекул

Устный опрос. Контрольная работа., примерные вопросы:

Точечные группы симметрии и дипольный момент молекулы. Виды поляризации молекул. Ориентационная поляризация. Уравнение Дебая. Формула Гуггенгейма-Смита. Уравнение Лоренца-Лоренца. Методы Дебая. Метод молекулярных пучков. Векторно-аддитивная схема для вычисления дипольных моментов.

Тема 3. Методы изучения поляризуемости и магнитной оптической активности

Устный опрос., примерные вопросы:

Закон Керра. Константы Керра и свойства молекулы. Явление Фарадея и связь с эффектом Зеемана. Магнитный круговой дихроизм и дисперсия магнитного оптического вращения.

Тема 4. Конформационный анализ органических и элементоорганических соединений

Устный опрос. Контрольная работа., примерные вопросы:

Общие понятия и принципы конформационного анализа. Конформационная номенклатура. Конформационные силы. Влияние внешних условий на конформации молекул. Дифракционные методы. Аддитивные методы. Спектроскопические методы. Методы квантовой химии в конформационном анализе.

Тема 5. Применение и перспективы развития электрических, электро- и магнитооптических методов исследования

Устный опрос., примерные вопросы:

Интеграция различных физических методов в решении сложных задач в различных областях наук. Перспективы развития физических методов исследования.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Темы контрольных работ:

1. Определение экспериментального дипольного момента молекулы в растворе (второй метод Дебая). Расчет дипольного момента молекулы по векторно-аддитивной схеме.
2. Экспериментальный и теоретический конформационный анализ молекул.

Итоговый контроль знаний студентов (вопросы к зачету)

1. Методы определения дипольных моментов.
2. Дипольный момент. Векторно-аддитивная схема вычисления.
3. Методы Дебая.
4. Явление Фарадея.
5. Эффект Зеемана.
6. Эффект Керра. Константы Керра.
7. Поляризуемость молекул, эллипсоид поляризуемости.
8. Метод релеевского рассеяния света.
9. Магнитный круговой дихроизм и дисперсия магнитного оптического вращения.
10. Понятия и принципы конформационного анализа.
11. Конформационные силы.
12. Конформационные эффекты.
13. Влияние внешних условий на конформации молекул.
14. Дифракционные методы в конформационном анализе.
15. Аддитивные методы
16. Спектроскопические методы
17. Принципы решения сложных конформационных задач.
18. Методы квантовой химии в конформационном анализе.
19. Совместное определение пространственного и электронного строения молекул.
20. Перспективы развития электрических, электро- и магнитооптических методов исследования

7.1. Основная литература:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 011000 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия" / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. Москва: Мир, 2012. - 683 с.
2. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2012. - 464 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4312

7.2. Дополнительная литература:

1. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования: для студентов хим. фак. [Электронный ресурс] / Казан. гос. ун-т, Науч.-образоват. центр КГУ "Материалы и технологии XXI в.", Хим. ин-т им. А.М. Бутлерова; [сост.: В.В. Горбачук и др.]. ?Казань, 2007. ? Режим доступа: <URL:<http://libweb.ksu.ru/ebooks/publicat/0-763596.pdf>>.
2. Валова (Копылова), В. Д. Физико-химические методы анализа [Электронный ресурс] : Практикум / В. Д. Валова (Копылова), Л. Т. Абесадзе. - М. : Издательско-торговая корпорация "Дашков и К-", 2012. - 224 с. <http://znanium.com/bookread2.php?book=430532>
3. Минкин В.И. Дипольные моменты в органической химии / В.И. Минкин. Ленинград: Химия, 1968. - 246 с.
4. Осипов О.А., Минкин В.И., Гарновский А.Д. Справочник по дипольным моментам / Москва: Высшая школа, 1971. - 414 с.
5. Верещагин А.Н. Индуктивный эффект: константы заместителей для корреляционного анализа / А.Н. Верещагин. Москва: Наука, 1988. - 111 с.

6. Верещагин А.Н. и др. Конформационный анализ углеводородов и их производных / А.Н. Верещагин, В.Е. Катаев, А.А. Бредихин и др. Москва: Наука, 1990. - 296 с.
7. Конформационный анализ элементоорганических соединений: [Сб. ст.]. Посвящается 80-летию со дня рождения Б. А. Арбузова / А.Н. Пудовик (редактор). Москва: Наука, 1983. - 310 с.
8. Верещагина Я.А., Ишмаева Э.А. Электронные взаимодействия и конформационный анализ фосфорорганических соединений / Я.А. Верещагина, Э.А. Ишмаева. Казань: КГТУ, 2006. - 127 с.
9. Ишмаева Э.А., Тимошева А.П., Тимошева Н.В., Верещагина Я.А. Справочник по дипольным моментам фосфорорганических соединений / Э.А. Ишмаева, А.П. Тимошева, Н.В. Тимошева, Я.А. Верещагина. Казань: Изд-во Казан. ун-та, 1998. - 119 с.
10. Успехи химии http://elibrary.ru/title_about.asp?id=7581

7.3. Интернет-ресурсы:

- Scirus - for scientific information - <http://www.scirus.com>
SpringerLink - Electronic journals, protocols and books - <http://www.springerlink.com>
Научная электронная библиотека - <http://www.elibrary.ru>
Портал для химиков - <http://www.chemport.ru>
Электронная библиотека - <http://www.rushim.ru>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Электрические, электро- и магнитооптические методы исследования" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Оборудование для практических работ:

1. Прибор для определения диэлектрической проницаемости веществ в разбавленных растворах - цифровой диэлькометр BI-870 (Brkhaven Instruments Crpratin, США).
2. Прибор для определения показателей преломления растворов - цифровой рефрактометр RA-500N (Kyt Electrnics, Япония).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Физико-химические методы исследования в химии .

Автор(ы):

Верещагина Я.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В. _____

"__" _____ 201__ г.