

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Методы магнитного резонанса, колебательной спектроскопии, дифракции рентгеновских лучей

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Каратаева Ф.Х. (Кафедра органической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Farida.Karataeva@kpfu.ru ; старший научный сотрудник, к.н. Климовицкий А.Е. (лаборатория физико-химических исследований, Отдел физической химии), Alexander.Klimovitskii@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

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

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен демонстрировать способность и готовность:

обработки ЯМР-, ИК-, УФ-, КР-, и ЭПР-спектров

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.2 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Физико-химические методы исследования в химии)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 2 курсе в 3 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

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

Контактная работа - 28 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 28 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 44 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 3 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР. Спектральные параметры. Химический сдвиг.	3	0	2	0	2
2.	Тема 2. Спин-спиновое взаимодействие.	3	0	4	0	4
3.	Тема 3. Шкалы химических сдвигов ЯМР ¹ H, ¹³ C и ³¹ P. Химические сдвиги органических соединений.	3	0	2	0	4

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Динамический ЯМР. Фурье-спектроскопия ЯМР. Двумерный ЯМР эксперимент.	3	0	2	0	3
5.	Тема 5. Эксперименты Cosy, Noesy. Одно- и двумерный эффект Оверхаузера. Возможности ЭПР-спектроскопии	3	0	2	0	3
6.	Тема 6. Физические основы спектроскопических методов	3	0	2	0	4
7.	Тема 7. Основы абсорбционной спектроскопии	3	0	2	0	4
8.	Тема 8. Основы ИК- и КР спектроскопии	3	0	2	0	8
9.	Тема 9. Пробоподготовка и способы получения и обработки спектров	3	0	4	0	4
10.	Тема 10. Дифракция от сложной структуры	3	0	2	0	4
11.	Тема 11. Аппаратура и методика рентгеноструктурного анализа	3	0	2	0	2
12.	Тема 12. Анализ дифрактограмм	3	0	2	0	2
	Итого		0	28	0	44

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР. Спектральные параметры. Химический сдвиг.

Классическая и квантово-механическая модели явления ЯМР. Макроскопическая намагниченность. Спектральные параметры. Химический сдвиг. Ядерное экранирование. Стандарты в ЯМР спектроскопии и * - шкала. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитная анизотропия соседних групп. Эффекты кольцевых токов. Эффекты электрических полей. Межмолекулярные эффекты - водородная связь, эффекты растворителя. ЯМР ¹H химические сдвиги органических соединений.

Тема 2. Спин-спиновое взаимодействие.

Непрямое спин - спиновое взаимодействие. Константы спин-спинового взаимодействия: прямые, геминальные, вицинальные, дальние. Химическая и магнитная эквивалентность ядер. Правило мультиплетности. Спиновые системы AX, AX₂, AX_n. Спин-спиновое взаимодействие протонов

Номенклатура спин-спиновых систем: системы первого и не первого порядка. Двух-, трех-спиновые системы. Сложное спин-спиновое взаимодействие с участием нескольких групп протонов. Константы спин-спинового взаимодействия H,H и химическая структура органических соединений. Стереоспецифичность геминальных и вицинальных констант спин-спинового взаимодействия. Соотношения между спектром и молекулярной структурой органических соединений. Двойной резонанс. Анализ спектров. Решение задач.

Тема 3. Шкалы химических сдвигов ЯМР ¹H, ¹³C и ³¹P. Химические сдвиги органических соединений.

Предельные углеводороды, непредельные углеводороды, циклические углеводороды, галогенпроизводные углеводородов, производные бензола, спирты, эфиры, альдегиды, кетоны, карбоновые кислоты. Биологически важные молекулы: углеводы, терпены и стероиды, аминокислоты, пептиды, белки. Биосинтез и введение биометки. Решение задач, анализ спектров. Эмпирические корреляции для оценки величин химических сдвигов ¹³C в предельных и непредельных углеводородах, циклических углеводородах, производных бензола. Расчет химических сдвигов молекулы алкана.

Тема 4. Динамический ЯМР. Фурье-спектроскопия ЯМР. Двумерный ЯМР эксперимент.

Динамический ЯМР: определение константы скорости и энthalпии активации. Применение ЯМР в кинетических исследованиях. Изучение внутримолекулярных перегруппировок с помощью метода ЯМР. Анализ спектров, решение задач

Фурье-спектроскопия ЯМР: принципы, импульсные последовательности, времена релаксации. Спин-решеточная релаксация ядер (T_1). Релаксационные механизмы. Экспериментальное определение T_1 . Соотношения между T_1 и химической структурой. Влияние протонов в CH , CH_2 и CH_3 группах на T_1 . Спин-спиновая релаксация ядер (T_2). Двумерный ЯМР эксперимент. Двумерная J - разрешенная ЯМР спектроскопия. Гетероядерная двумерная J - разрешенная ^{13}C ЯМР спектроскопия. Гомоядерная двумерная J - разрешенная ^1H ЯМР спектроскопия. Эксперименты Cosy , Noesy . Одно- и двумерный эффект Оверхаузера. Анализ двумерных спектров ЯМР простых аминокислот.

Тема 5. Эксперименты Cosy , Noesy . Одно- и двумерный эффект Оверхаузера. Возможности ЭПР-спектроскопии

Эксперименты Cosy , Noesy . Одно- и двумерный эффект Оверхаузера. Анализ двумерных спектров ЯМР простых аминокислот.

Устройство, принцип работы и основные блоки ЭПР-спектрометра. Температурный диапазон съемки ЭПР-спектров. Особенности ЭПР-спектроскопии *in situ*. Структурные исследования. Спектры ЭПР комплексов ионов переходных металлов. Интерпретация g-факторов. Эффект Яна-Теллера.

Тема 6. Физические основы спектроскопических методов

Классификация методов оптической спектроскопии. Уровни энергии и переходы между ними. Электромагнитное излучение: его природа и взаимодействие с веществом. Энергии, соответствующие различным видам излучения. Величины: длина волны, частота, волновое число, интенсивность. Спектр. Форма линии. Закон Бугера-Ламберта-Бера.

Теория колебательных спектров. Гармонические и ангармонические колебания. Поглощение излучения молекулярными колебаниями, правила отбора. Расчет колебательных спектров.

Тема 7. Основы абсорбционной спектроскопии

Основы теории электронных спектров молекул. Колебания двухатомных молекул, гармоническое приближение. Электрон-электронные взаимодействия и обозначения термов. Классификация электронных переходов, их относительное положение. Неорганические и комплексные соединения. Качественный и количественный анализ, информация, получаемая из электронных спектров.

Аппаратура адсорбционной спектроскопии. Устройство современных спектрометров. Двухлучевые спектрометры, источники излучения, монохроматоры, приемники излучения. Подготовка образцов.

Тема 8. Основы ИК- и КР спектроскопии

Силовая постоянная. Колебания многоатомных молекул. Правила отбора для ИК и КР спектров. Изотопное замещение. Интенсивность поглощения. Форма полос поглощения. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Симметрия колебаний.

Характеристичность частот, область "отпечатков пальцев". Влияние различных факторов на положение частот. Обнаружение и исследование водородных связей в ИК-спектрах. Применение ИК и КР спектроскопии в конформационном анализе.

Тема 9. Пробоподготовка и способы получения и обработки спектров

Устройство, принцип действия, составные части ИК-спектрометров. Типы ИК-спектрометров. Подготовка образцов различного типа. Методика съемки образцов. Устройства для съемки ИК-спектров газов, спектров однократного и многократного отражения, полного внутреннего отражения, спектров твердых образцов на пропускание.

Примеры применения ИК - спектроскопии. Математическая обработка спектров.

Устройство КР-спектрометров, лазерные источники излучения.

Применение Фурье-КР-спектроскопии. Математическая обработка спектров.

Атласы и каталоги инфракрасных спектров.

Тема 10. Дифракция от сложной структуры

Этапы рентгеноструктурного анализа. Формула вычисления плотности кристалла по молекулярной массе и объему элементарной ячейки кристалла.

Формулы условия Лауэ, уравнения Брэгга-Вульфа. Дифракция от сложной структуры как от совокупности простых структур с теми же параметрами элементарных ячеек, параллельно сдвинутых относительно друг друга.

Тема 11. Аппаратура и методика рентгеноструктурного анализа

Рентгеновские фотокамеры, дифрактометры, современные источники рентгеновского излучения, современная аппаратура измерения интенсивностей отражений, ориентации кристалла.

Рассеяние объектами с различной упорядоченностью. Малоугловое рассеяние дисперсными системами. Растворы частиц.

Влияние растворителя. Сферически-симметричная частица.

Среднеугловое рассеяние. Вариация контраста.

Малоугловые исследования кристаллических материалов, полидисперсных объектов (расчет распределения по размерам), аморфных тел, полимеров и жидкостей.

Тема 12. Анализ дифрактограмм

Малоугловые исследования кристаллических материалов, полидисперсных объектов (рассеяние. Вариация контраста. расчет распределения по размерам), аморфных тел, полимеров и жидкостей. Понятие интенсивности дифракционного отражения. Структурная амплитуда. Различные формулы структурной амплитуды. Связь структурной амплитуды и интенсивности отражения.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

MRC - <http://mrc.org.ua/fiziko-himicheskie-metodi-issledovanij-materialov>

ИКС - <http://him.1september.ru/articlef.php?ID=200202101>

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН - http://www.catalysis.ru/block/index.php?ID=1&SECTION_ID=172

меддр - http://www.meddr.ru/rukovodstvo_k_prakticheskim_zanyatijam_po_me/metody_fiziko-himicheskikh_issledovaniy

НЕХУДОЖЕСТВЕННАЯ БИБЛИОТЕКА - <http://www.nehudlit.ru/books/subcat316.html> энциклопедия физики и

техники - http://femto.com.ua/articles/part_1/1410.html

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	<p>Важной составной частью учебного процесса в университете являются практические занятия. Практические (семинарские) занятия проводятся главным образом по дисциплинам, требующим научно-теоретического обобщения литературных источников, и помогают студентам глубже усвоить учебный материал, приобрести навыки творческой работы над документами и первоисточниками.</p> <p>Планы семинарских занятий, их тематика, рекомендуемая литература, цель и задачи ее изучения сообщаются преподавателем на вводных занятиях или в методических указаниях по данной дисциплине.</p> <p>Начиная подготовку к занятию, преподаватель указывает студентам страницы в конспекте лекций, разделы учебников и учебных пособий, чтобы они получили общее представление о месте и значении темы в изучаемом курсе. Затем следуют рекомендации по работе с дополнительной литературой.</p> <p>Подготовка к практическому занятию включает 2 этапа:</p> <p>1й - организационный;</p> <p>2й - закрепление и углубление теоретических знаний.</p> <p>На первом этапе студент планирует свою самостоятельную работу, которая включает:</p> <ul style="list-style-type: none">-уяснение задания на самостоятельную работу;-подбор рекомендованной литературы;-составление плана работы, в котором определяются основные пункты предстоящей подготовки. <p>Составление плана дисциплинирует и повышает организованность в работе.</p> <p>Второй этап включает непосредственную подготовку студента к занятию. Начинать надо с изучения рекомендованной литературы. Необходимо помнить, что на лекции обычно рассматривается не весь материал, а только его часть. Остальная его часть восполняется в процессе самостоятельной работы. В связи с этим работа с рекомендованной литературой обязательна. Особое внимание при этом необходимо обратить на содержание основных положений и выводов, объяснение явлений и фактов, уяснение практического приложения рассматриваемых теоретических вопросов. В процессе этой работы студент должен стремиться понять и запомнить основные положения рассматриваемого материала, примеры, поясняющие его, а также разобраться в иллюстративном материале.</p> <p>Заканчивать подготовку следует составлением плана (конспекта) по изучаемому материалу (вопросу). Это позволяет составить концентрированное, сжатое представление по изучаемым вопросам.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>В процессе подготовки к занятиям при необходимости следует обращаться за консультацией к преподавателю. Идя на консультацию, необходимо хорошо продумать вопросы, которые требуют разъяснения.</p> <p>Записи имеют первостепенное значение для самостоятельной работы студентов. Они помогают понять построение изучаемого материала, выделить основные положения, проследить их логику и тем самым проникнуть в творческую лабораторию автора. Ведение записей способствует превращению чтения в активный процесс, мобилизует, наряду со зрительной, и моторную память. Следует помнить: у студента, систематически ведущего записи, создается свой индивидуальный фонд подсобных материалов для быстрого повторения прочитанного, для мобилизации накопленных знаний. Особенно важны и полезны записи тогда, когда в них находят отражение мысли, возникшие при самостоятельной работе.</p> <p>Важно развивать у студентов умение сопоставлять источники, продумывать изучаемый материал. Большое значение имеет совершенствование навыков конспектирования у студентов. Изучение дисциплины следует начинать с проработки настоящей рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>В ходе подготовки к занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях: журналах, газетах и т.д. При этом требуется учесть рекомендации преподавателя и требования учебной программы. Студент может дополнить список использованной литературы современными источниками, не представленными в списке рекомендованной литературы, и в дальнейшем использовать собственные подготовленные учебные материалы при написании курсовых и дипломных работ.</p> <p>Студентам рекомендуется получить в Библиотечно-информационном центре университета учебную литературу по дисциплине, необходимую для эффективной работы на всех видах аудиторных занятий, а также для самостоятельной работы по изучению дисциплины.</p> <p>Успешное освоение курса предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
зачет	<p>1. Подготовка к зачету заключается в изучении и тщательной проработке студентом учебного материала дисциплины с учётом учебников, лекционных и семинарских занятий, сгруппированном в виде контрольных вопросов.</p> <p>2. Зачет проводится в виде тестирования или по билетам. В случае проведения итогового тестирования ведущему преподавателю предоставляется право воспользоваться примерными заданиями или составить новые задания в полном соответствии с материалом учебной дисциплины.</p> <p>3. На зачет (в том числе и на итоговое тестирование) студент обязан предоставить:</p> <ul style="list-style-type: none"> - полный конспект лекций (даже в случаях разрешения свободного посещения учебных занятий); - полный конспект семинарских занятий; - реферат (рефераты) по указанной преподавателем тематике (в случае пропусков (по неуважительной или уважительной причине) в качестве отработки пропущенного материала); - конспекты дополнительной литературы по курсу (по желанию студента). <p>4. На зачете по билетам студент даёт ответы на вопросы билета после предварительной подготовки. Студенту предоставляется право отвечать на вопросы билета без подготовки по его желанию. Преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы, если студент недостаточно полно осветил тематику вопроса, если затруднительно однозначно оценить ответ, если студент не может ответить на вопрос билета, если студент отсутствовал на занятиях в семестре.</p> <p>5. Качественной подготовкой к зачету является:</p> <ul style="list-style-type: none"> - полное знание всего учебного материала, выражающееся в строгом соответствии излагаемого студентом материалу учебника, лекций и семинарских занятий; - свободное оперирование материалом, выражающееся в выходе за пределы тематики конкретного вопроса с целью оптимально широкого освещения вопроса (свободным оперированием материалом не считается рассуждение на общие темы, не относящиеся к конкретно поставленному вопросу); - демонстрация знаний дополнительного материала; - чёткие правильные ответы на дополнительные вопросы, задаваемые экзаменатором с целью выяснить объём знаний студента. <p>Неудовлетворительной подготовкой, вследствие которой студенту не зачитывается прохождение курса, является:</p> <ul style="list-style-type: none"> - недостаточное знание всего учебного материала по курсу, выражающееся в слишком общем соответствии либо в отсутствии соответствия излагаемого студентом материалу учебника, лекций и семинарских занятий; - нечёткие ответы или отсутствие ответа на дополнительные вопросы, задаваемые экзаменатором с целью выяснить объём знаний студента; – отсутствие подготовки к зачету или отказ студента от сдачи зачета.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Специализированная лаборатория.

Специализированная лаборатория.

Специализированная лаборатория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

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

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.2 Методы магнитного резонанса, колебательной
спектроскопии, дифракции рентгеновских лучей

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Якимова, Людмила Сергеевна. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .- Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .- (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .- Загл. с экрана .- Для 2-го семестра .- Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015. - 19 с. Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ . Режим доступа: http://libweb.kpfu.ru/ebooks/07-ICH/07_54_000903.pdf
2. Каратаева Ф.Х., Клочков В.В. Спектроскопия ЯМР в органической химии. Часть I. [Электронный ресурс], 2013. - 132 с. (Для студентов и аспирантов химического и биологического факультетов) - Режим доступа: http://kpfu.ru/publication?p_id=68614
3. Пентин, Юрий Андреевич. 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.

Дополнительная литература:

1. Порай-кошиц, Михаил Александрович. Практический курс рентгеноструктурного анализа : учебное пособие / М. А. Порай-кошиц . - Москва : Издательство Московского университета, .Т. 2 . - Москва : Издательство Московского университета, 1960 . - 632 с.
2. Федотов, М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости [Электронный ресурс] : монография / М.А. Федотов. ? Электрон. дан. ? Москва : Физматлит, 2010. ? 384 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2151>
3. Драго, Рассел. Физические методы в химии : в 2 томах / Рассел Драго ; [пер. с англ. А. А. Словьянова ; под ред. О. А. Реутова] . - Москва : Мир, 1981.Т. 1 . - 1981 . - 422 с. : ил.
4. Драго, Рассел. Физические методы в химии : в 2 томах / Рассел Драго ; [пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова] . - Москва : Мир, 1981.Т. 2 . - 1981 . - 456 с. : ил.
5. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии / Л.А. Казицына, Н.Б. Куплетская. - М.: Высшая школа, 1971. - 264 с.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.2 Методы магнитного резонанса, колебательной
спектроскопии, дифракции рентгеновских лучей

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен обучающимся. 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.