

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 09.09.2021 22:45:49  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«Санкт-Петербургский государственный технологический институт**  
**(технический университет)»**  
**(СПбГТИ(ТУ))**



**Рабочая программа дисциплины**  
**СТРУКТУРНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Направление подготовки  
**04.06.01 Химические науки**

Направленность образовательной программы  
**Физическая химия**

Квалификация выпускника  
**«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения

**Очная**

Санкт-Петербург

2016

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы .....	4
3. Объем дисциплины .....	4
4. Содержание дисциплины .....	5
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий .....	5
4.2. Занятия лекционного типа .....	5
4.3. Занятия семинарского типа (лабораторные работы) .....	7
4.4. Самостоятельная работа .....	7
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине .....	11
10.1. Информационные технологии .....	11
10.2. Программное обеспечение .....	11
10.3. Информационные справочные системы .....	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	12
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации ...	13

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы аспирантуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<b>ОПК-1</b>	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- спектроскопические, дифракционные, оптические, резонансные и другие структурные методы исследования;</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования;</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- навыками использования современных методов исследования структуры материалов.</li> </ul>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Структурные методы исследования» относится к факультативной части (ФТД.В.01) и изучается на 3 курсе в 6 семестре.

Полученные в процессе изучения дисциплины «Структурные методы исследования» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе аспиранта и при выполнении научно-квалификационной работы (диссертации).

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	2/ 72
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>42</b>
занятия лекционного типа	21
занятия семинарского типа, в т.ч. лабораторные работы	21
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>30</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (зачет, зачет с оценкой, экзамен)	Зачет (6 сем.)

#### 4. Содержание дисциплины.

##### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа (лабораторные работы), академ. часы	Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции
1.	Общая характеристика и классификация физико-химических методов.	4	-	10	ОПК-1
2.	Рентгенодифракционные методы и их применение в химии	10	11	10	ОПК-1
3	Спектроскопические, резонансные, оптические и другие методы	7	10	10	ОПК-1

##### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	<b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов</b> Спектроскопические, дифракционные, оптические, резонансные и другие методы.	4	Слайд-презентация
2	<b>Рентгенодифракционные методы и их применение в химии</b> Основы дифракции рентгеновских лучей. Обратная решетка. Основные формулы рентгеноструктурного анализа Основы рентгеноструктурного анализа; пакеты программ для обработки экспериментов. Профильный анализ. Обработка рентгеновского порошкового эксперимента. Рентгенофазовый анализ Определение параметров элементарных ячеек Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным. Метод Ритвельда. Методы рентгеновской дифракции для определения характеристик нано-объектов	10	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
3	<p><b>Спектроскопические, резонансные, оптические и другие методы</b>  Вращательная и колебательная спектроскопии и их применение в химии. Электронная спектроскопия. Спектры флуоресценции и фосфоресценции Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и Оже-спектроскопии. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Ядерный квадрупольный резонанс. Ядерный гамма-резонанс. Методы и применение масс-спектрометрии. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах. Методы изучения поляризуемости молекул. Микроскопические и зондовые методы.</p>	7	Слайд-презентация

#### 4.3. Занятия семинарского типа (лабораторные работы).

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p><b>Рентгенодифракционные методы и их применение в химии</b></p> <p>Определение параметров элементарных ячеек.            Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным.            Методы рентгеновской дифракции для определения характеристик нано-объектов.            Анализ кристаллической структуры            Высокотемпературная дифракция</p>	11	Наглядная демонстрация на компьютере возможностей обработки рентгеновских дифрактограмм
3	<p><b>Спектроскопические, резонансные, оптические и другие методы</b></p> <p>Идентификация ИК-спектров жидких, газообразных и твердых образцов.            Анализ ИК-спектров диффузного отражения образцов, измеренных на Фурье-спектрометре с приставкой диффузного отражения, корректировка базовой линии, разложение суммарного контура на индивидуальные компоненты. Определение состава вещества или раствора методом рефракции.            Определение дипольного момента вещества</p>	10	Коллективное обсуждение

#### 4.4. Самостоятельная работа.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	<p><b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов</b></p> <p>Общая характеристика и классификация физико-химических методов. Прямая и обратная задачи. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Возможности и области применения физико-химических методов исследования.</p>	10	Устный опрос

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	<p><b>Рентгенодифракционные методы и их применение в химии</b>  Симметрия в кристаллах.  Качественный фазовый анализ, работа с порошковыми базами данных. Идентификация фаз. Методы качественного фазового анализа двухфазных и многофазных смесей.  1. Методы высокотемпературной дифрактометрии. Зависимость изменения параметров элементарной ячейки от температуры. Определение коэффициента термического расширения. Метод Ритфельда. Определение распределения частиц по размерам.</p>	10	Устный опрос
3	<p><b>Спектроскопические, резонансные, оптические и другие методы</b>  Классификация и отнесение электронных переходов и соответствующих полос в УФ и видимых спектрах.  Применение методов абсорбционной ИК и УФ спектроскопии в количественном анализе, исследовании равновесий и кинетики реакций  Определение структуры молекулы по химическим сдвигам и спин-спиновым расщеплениям в спектрах ЯМР  Динамический ЯМР, изучение обменных и других быстро протекающих процессов  Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов реакций методом ЭПР  Изомерный (химический) сдвиг в спектрах Мессбауэра, квадрупольные и магнитные взаимодействия, применения в химии  Типы ионов в масс-спектрометрии. Методы ионизации молекул. Электронный удар, фото-ионизация, ионизация в электростатическом неоднородном поле, поверхностная ионизация, химическая ионизация, комбинированные методы. Принципы устройства масс-спектрометров. Метод индуктивно связанной плазмы.  Зондовые методы (сканирующая туннельная, атомно-силовая и сканирующая электрохимическая микроскопия). Просвечивающая и растровая электронная микроскопия.</p>	10	Устный опрос

## **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.**

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медия: <http://media.technolog.edu.ru>

## **6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации**

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

К сдаче зачета допускаются аспиранты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) для проверки знаний, умений и навыков.

При сдаче зачета аспирант получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки аспиранта к устному ответу - до 50 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

### **Вариант № 1**

1. Изомерный (химический) сдвиг в спектрах Мессбауэра, квадрупольные и магнитные взаимодействия, применения в химии.
2. Ядерный спиновый и магнитный моменты. Магнитно активные ядра атомов химических элементов и их изотопов. Физические основы явления ЯМР. Снятие вырождения спиновых состояний ядер в постоянном магнитном поле, эффект Зеемана. Условия возникновения ЯМР.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1



**7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

**а) основная литература:**

1. Химическая диагностика материалов / В. Г. Корсаков, М. М. Сычев, С. В. Мякин, Л. Б. Сватовская; Петербург. гос. ун-т путей сообщения. - СПб.: Петербург. гос. ун-т путей сообщения, 2010. - 224 с.
2. Грибов, Л. А. Колебания молекул / Л. А. Грибов; РАН. Ин-т геохимии и аналит. химии им. В. И. Вернадского. - М.: Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2009. - 542 с.
3. Бёккер, Ю. Спектроскопия / Ю. Бёккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с.
4. Пупышев, А. А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ / А. А. Пупышев. - М.: Техносфера, 2009. - 782 с.

**б) дополнительная литература:**

1. Цао, Г. Наноструктуры и наноматериалы. Синтез, свойства и применение / Г. Цао, Ин Ван ; Пер. с англ. 2-го изд.: А. И. Ефимова, С. И. Каргов ; Науч. ред. рус. изд. В. Б. Зайцев ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Науч.-образоват. центр по нанотехнологиям. - М. : Научный мир, 2012. - 520 с.
2. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М.: КомКнига. Ч. 1: Общие вопросы спектроскопии. - 4-е изд., стер.. - 2007. - 236 с.
3. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ". Ч. 2: Атомная спектроскопия. - 5-е изд.. - 2009. - 415 с.
4. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ". Ч. 3: Молекулярная спектроскопия. - 5-е изд.. - 2009. - 527 с.

**в) вспомогательная литература:**

1. Ньунхем, Э. Свойства материалов. Анизотропия, симметрия, структура / Э. Ньунхем. - М. : Ижевск, 2007. - 652 с.
2. Попов, Г. М. Кристаллография / Г. М. Попов, И. И. Шафрановский. - М. : Высшая школа, 1972. - 352 с.
3. Современная кристаллография : в 4 т. / под ред. Б. К. Вайнштайна. - М. : Наука, 1979-1981.
  - Т. 1 : Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. - 1979. - 384 с.
  - Т. 2 : Структура кристаллов. - 1979. - 360 с.
  - Т. 4 : Физические свойства кристаллов. - 1981. - 496 с.
4. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. - М.: Мир. 2003. - 683 с.
5. Банкер, Ф. Симметрия молекул и спектроскопия / Ф. Банкер, П. Йенсен. – М.: Мир, научный мир, 2004. – 763 с.
6. 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.
7. Мальцев, А. А. Молекулярная спектроскопия / А. А. Мальцев. - М.: МГУ, 1980. - 272 с.
8. Ливер, Э. Электронная спектроскопия неорганических соединений. М.: Мир, 1987. В 2-х частях.
9. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР: Учеб. пособие. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 279с.
10. Дьяков А.О., Новаковская Э.Г., Новичихин А.И., Халонин А.С. Физико-химические методы анализа: Учеб. пособие. СПб: Изд-во СПбГПУ, 2004. - 163 с.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

1. Учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>
2. Электронно-библиотечные системы:
3. «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
4. «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Структурные методы исследования» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для обучающихся является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия аспирант должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

### **10.2. Программное обеспечение.**

В учебном процессе используется лицензионное программное обеспечение:

- Операционная система Microsoft Windows XP (Государственный контракт №24 от 14.09.2007).

- Операционная система MS WINDOWS v.7, v.8, v.10 (Договор 9551860805 от 03.10.2018).

- Microsoft Office 2007 (Государственный контракт №24 от 14.09.2007).

- Microsoft Office 2010 (Договор 05(05)13 от 22.01.2013).

- Microsoft Office 2013 (Договор №02(03)15 от 20.01.2015).

- Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security (Договор №178 от 04.12.2017).

- Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security (Договор №279/2018 от 21.11.2018).

### **10.3. Информационные справочные системы.**

Международные мультидисциплинарные аналитические реферативные базы данных научных публикаций Web of Science (режим доступа: <http://apps.webofknowledge.com>, свободный с любого зарегистрированного компьютера института), Scopus (режим доступа: <http://www.scopus.com>, свободный с любого зарегистрированного компьютера института)

### **11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Для ведения лекционных занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники, на 15 посадочных мест. Для проведения лабораторных занятий используются помещения Инжинирингового центра, кафедры физической химии, кафедры неорганической химии.

Материально-техническое обеспечение дисциплины:

доступ к фондам учебных пособий, библиотечным фондам с периодическими изданиями по соответствующим темам, наличие компьютеров, подключенных к сети Интернет и оснащенных средствами медиапрезентаций (медиакоммуникаций);

Рентгеновский дифрактометр XRD-7000S (Shimadzu) с высокотемпературной приставкой НТК-1200N (Anton Paar);

ИК-Фурье спектрометр ФСМ-1202;

Весы OHAUS RV-313;

Рефрактометр ИРФ-470;

Рентгеновский дифрактометр Rigaku Corporation SmartLab 3;

Микроскоп сканирующий (растровый) электронный Tescan Vega 3 SBH;

Прибор для синхронного термического анализа Netzsch STA 449 F3Jupiter;

Прибор для измерений температуро- и теплопроводности Netzsch LFA 457

MicroFlash;

ИК-Фурье спектрометр Shimadzu IRTracer-100;

Анализатор размера частиц лазерный Shimadzu SALT-7500nano;

Анализатор термомеханический Shimadzu TMA-60.

### **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Структурные методы исследования»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Компетенции		
Индекс	Формулировка <sup>1</sup>	Этап формирования <sup>2</sup>
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	промежуточный

**2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания.**

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	<b>Знает</b> классификацию, общую характеристику и возможности современных физико-химических методов диагностики материалов; <b>Умеет</b> оценивать и анализировать наиболее актуальные направления исследований в современной физической химии; <b>Владет</b> навыками критического анализа и оценки актуальных направлений исследований в современной физической химии.	Правильные ответы на вопросы №1-15 к зачету	ОПК-1
Освоение раздела №2	<b>Знает</b> дифракционные структурные методы исследования, способы интерпретации данных рентгеновской дифракции; <b>Умеет</b> самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием рентгеновских методов исследования; <b>Владет</b> навыками использования	Правильные ответы на вопросы №16-25 к зачету	ОПК-1

<sup>1</sup> **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

<sup>2</sup> этап формирования компетенции выбирается по п.2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие.)

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
	рентгеновских методов исследования структуры материалов.		
Освоение раздела № 3	<b>Знает</b> спектроскопические, оптические, резонансные и другие структурные методы исследования; <b>Умеет</b> самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием спектроскопических, оптических, резонансных и других структурных методов исследования; <b>Владеет</b> навыками использования спектроскопических, оптических, резонансных и других структурных методов исследования материалов.	Правильные ответы на вопросы №26-50 к зачету	ОПК-1

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):  
по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, результат оценивания – «зачтено», «не зачтено».

**3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации. Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-1:**

1. Общая характеристика и классификация структурных методов исследования. Прямая и обратная задачи.
2. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Возможности и области применения структурных методов исследования.
3. Квантово-химические методы исследования.
4. Рентгеновские методы исследования структуры твердофазных материалов.
5. Спектральные методы исследования веществ.
6. Аналитические методы исследования материалов.
7. Резонансные методы.
8. Изомерный (химический) сдвиг в спектрах Мессбауэра, квадрупольные и магнитные взаимодействия, применения в химии.
9. Оже-спектроскопия.
10. Зондовые методы.
11. Просвечивающая и растровая электронная микроскопия.
12. Электронная микроскопия высокого разрешения.
13. Зондовый рентгено-флуоресцентный микроанализ.
14. ЯМР и ЯКР спектроскопия твердого тела.
15. Применение методов ЯМР в исследованиях наночастиц.
16. Основы дифракции рентгеновских лучей. Обратная решетка.
17. Основные формулы рентгеноструктурного анализа.
18. Основы рентгеноструктурного анализа; пакеты программ для обработки экспериментов.
19. Профильный анализ. Обработка рентгеновского порошкового эксперимента.

20. Рентгенофазовый анализ.
21. Определение параметров элементарных ячеек.
22. Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным. Метод Ритвельда.
23. Методы рентгеновской дифракции для определения характеристик нано-объектов.
24. Обзор банков структурных данных. Кембриджский банк структурных данных (CSD), банк белковых структур (PDB), неорганический банк структурных данных (ICSD). Основные направления использования банков структурных данных.
25. Алгоритмы поиска информации в CSD и других базах данных. Программы визуализации молекул и кристаллических структур, статистической обработки данных.
26. Вращательная спектроскопия и ее применение в химии. Метод микроволновой вращательной спектроскопии.
27. Вращательные спектры комбинационного рассеяния (КР). Схема эксперимента и условия получения спектров КР. Применение лазеров.
28. Инфракрасные (ИК) спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР).
29. Классический подход к решению прямой и обратной колебательных задач. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные и нормальные координаты молекул.
30. Типы симметрии нормальных колебаний. Приводимые и неприводимые представления. Таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп симметрии и правила пользования ими при определении типов симметрии и активности нормальных колебаний молекул в спектрах ИК и КР.
31. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций. Методы и техника ИК- и КР-спектроскопии. Понятия о методах НПВО и МНПВО.
32. Критерии отнесения полос поглощения к различным электронным переходам. Влияние эффектов сопряжения, пространственных эффектов и полярности растворителя на электронные спектры поглощения молекул. Эмпирические правила Вудворда-Физера.
33. Спектры флуоресценции и фосфоресценции. Первичные фотофизические процессы в молекулах. Диаграмма Яблонского.
34. Безызлучательные и излучательные переходы между электронными состояниями одинаковой и различной мультиплетности. Эффект Стокса-Ломмеля и правило зеркальной симметрии электронных спектров люминесценции Левшина.
35. Квантовый и энергетический выходы люминесценции. Взаимосвязь интенсивности спектров люминесценции и интенсивности возбуждающего излучения. Эффект Шпольского.
36. Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и Оже-спектроскопии. Схема возникновения рентгеноэлектронной и фотоэлектронной эмиссии, рентгеновских спектров поглощения и флуоресценции, Оже-эффекта. Определение энергии связи с ядром электронов на внешних и внутренних электронных оболочках атомов.
37. Химические сдвиги и их интерпретация. Тонкая структура фотоэлектронных спектров. Информативность методов рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и оже-спектроскопии и их применение в химии.
38. Ядерный спиновый и магнитный моменты. Магнитно активные ядра атомов химических элементов и их изотопов. Физические основы явления ЯМР. Снятие вырождения спиновых состояний ядер в постоянном магнитном поле, эффект Зеемана. Условия возникновения ЯМР.
39. Влияние электронного окружения на результирующее магнитное поле, константы электронного экранирования ядер. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Шкалы химических сдвигов.

40. Спин-спиновое взаимодействие ядер и его природа. Энергетические состояния систем взаимодействующих спинов и мультипликативные функции для описания этих систем.
41. Константы спин-спинового взаимодействия, их физический смысл, классификация и информативность. Уравнения Карплуса. Анализ спектров ЯМР первого и других порядков. Протонный магнитный резонанс, ЯМР  $^{13}\text{C}$  и других ядер. Метод двойного резонанса.
42. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР). Физические принципы спектроскопии ЭПР. Условия возникновения ЭПР. Эффект Зеемана. Электронный g-фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии спина электрона с одним или несколькими ядерными спинами.
43. Ядерный квадрупольный резонанс. Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие электрического квадрупольного момента ядер с неоднородным электрическим полем. Градиент поля, создаваемого электронной оболочкой на ядрах.
44. Ядерный гамма-резонанс. Гамма-резонансная ядерная флуоресценция, эффект Мессбауэра. Эффект Доплера и энергия отдачи ядер. Химический сдвиг и влияние химического окружения в спектроскопии ядерного гамма-резонанса. Квадрупольные и магнитные взаимодействия.
45. Методы и применение масс-спектрометрии. Типы ионов в масс-спектрометрии. Методы ионизации молекул. Электронный удар, фото-ионизация, ионизация в электростатическом неоднородном поле, поверхностная ионизация, химическая ионизация, комбинированные методы.
46. Идентификация веществ. Таблицы массовых чисел. Соотношение изотопов. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей.
47. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах. Использование молекулярной рефракции и дипольных моментов для определения строения молекул. Методы определения дипольных моментов.
48. Зондовые методы (сканирующая туннельная, атомно-силовая и сканирующая электрохимическая микроскопия). Базовые принципы. Проблемы. Особенности.
49. Просвечивающая и растровая электронная микроскопия.
50. Электронная микроскопия высокого разрешения (HREM). Зондовый рентгено-флуоресцентный микроанализ.

**К зачету допускаются аспиранты, выполнившие все формы текущего контроля.**

При сдаче зачета аспирант получает два вопроса из перечня, приведенного выше. Время подготовки аспиранта к устному ответу на вопросы - до 50 мин.

**4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПбГУ.

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.