

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

**Теоретические и экспериментальные методы
исследования в неорганической химии**

**Модульная программа лекционного курса, консуль-
таций и самостоятельной работы студентов, задачи и
справочные материалы**

Курс 4-й, VIII семестр
Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов IV курса факультета естественных наук, направление подготовки 020100 «Химия (бакалавр)». Комплекс содержит программу курса, задачи для семинаров и самостоятельной работы, а также необходимые справочные материалы. Может быть полезным для студентов и аспирантов других вузов химического профиля.

Составители:
Козлова С.Г., ст. преп.

Учебно-методический комплекс разработан в рамках Программы развития НИУ-НГУ.

© Новосибирский государственный
университет, 2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	5
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии».....	6
4. Структура и содержание дисциплины	7
Рабочий план (по неделям семестра). Весенний семестр	9
Программа курса лекций	10
I. Теоретические методы исследования.....	10
II. Экспериментальные методы исследования.....	11
5. Образовательные технологии	13
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.....	13
Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы.....	13
Требования к экзамену.....	15
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	15
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	16

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) бакалавр). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой неорганической химии.

Дисциплина (курс) «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» имеет своей целью: подготовить специалистов, обладающих знаниями по принципиальным основам теоретических и экспериментальных физических методов исследования. Предполагается, что данный курс позволит студентам успешно ориентироваться в выборе физических методов исследования для решения химических и физико-химических задач, интерпретировать и анализировать теоретические и экспериментальные данные.

В курсе студентам предлагается познакомиться с современными квантово-химическими методами анализа электронного строения веществ и применения квантово-химических методов к важнейшими экспериментальным методам такими, как УФ, ИК, КР-спектроскопия, ЯМР, ЭПР, магнетохимия и др., позволяющих получать необходимую информацию о физико-химических свойствах неорганических веществ и материалов.

Особенностью данного курса является наличие большого объема данных сопоставления экспериментальных и теоретических результатов, что должно приводить к успешному освоению теоретических основ расчетных и экспериментальных методов. Это обеспечивает научную новизну предложенного курса, а также делает его уникальным по отношению к другим подобным учебным курсам, как в России, так и за рубежом.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-6, ОК-9, ОК-13, ОК-15; профессиональных компетенций: ПК-1, ПК-2, ПК-3.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, семинарские занятия, консультации, самостоятельная работа студента.

Результатом прохождения дисциплины является итоговая оценка по пятибалльной шкале (экзамен).

Программой дисциплины предусмотрен следующий вид контроля:

Итоговый контроль. Итоговую оценку за семестр (положительную или неудовлетворительную) студент может получить на экзамене в конце семестра.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 академических часа. Программой дисциплины предусмотрены 30 часов лекционных, 30 семинарских, 68 часов самостоятельной работы студентов, 13 часов консультаций, и 3 часа на сдачу экзамена.

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» имеет своей целью: подготовить специалистов, обладающих знаниями по принципиальным основам теоретических и экспериментальных физических методов исследования и их взаимосвязи. Предполагается, что данный курс позволит студентам успешно ориентироваться в выборе физических методов исследования для решения химических и физико-химических задач, интерпретировать и анализировать теоретические и экспериментальные данные.

Студентам предлагается познакомиться с современными квантовохимическими методами анализа электронного строения веществ и важнейшими экспериментальными методами такими, как УФ, ИК, КР-спектроскопия, ЯМР, ЭПР, магнетохимия и др., позволяющих получать необходимую информацию о физико-химических свойствах неорганических веществ и материалов.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» является частью профессионального (специального) цикла ООП, вариативная часть (общепрофессиональные дисциплины), по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «бакалавр».

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Математический анализ;
- Высшая алгебра (линейная алгебра, аналитическая геометрия);
- Физика (электромагнитное излучение, кулоновское взаимодействие, дифракция);
- Неорганическая химия (строение и свойства атомов, периодический закон, строение молекул, теория химической связи, стереохимия);
- Физическая химия (природа химической связи в молекулах и кристаллах, химическая термодинамика);

- Строение вещества (электронные конфигурации атомов и ионов, гибридизация, электронные переходы);
- Строение неорганических веществ.

Таким образом, данный курс лекций базируется на пройденных ранее дисциплинах, входящих в учебный план естественного факультета университета, прежде всего химии, математики и физики.

Результаты освоения дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии»

- **Общекультурные компетенции:**

- использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ОК-6);
- владеет основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, имеет навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-9);
- настойчив в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и служебных обязанностей (ОК-13);
- обладает способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей (ОК-15).

- **Профессиональные компетенции:**

- понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности (ПК-1);
- владеет основами теории фундаментальных разделов химии (неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, биохимии, химической технологии) (ПК-2);
- обладает способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3).

В результате освоения дисциплины обучающийся студент должен:

- иметь представление о современных теоретических и экспериментальных методах и подходах исследования новых и перспективных неорганических веществ и материалов;
- знать принципы и условия применения теоретических и экспериментальных методов на практике;
- уметь проводить квантово-химические расчеты типовых задач: определение пространственной структуры, электронного строения и энергий образования молекулярных комплексов; определение потенциалов ионизации, сродства к электрону/протону и др.;
- иметь представление о форме изложения результатов в научных публикациях.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, всего 144 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Формы текущего контроля успеваемости (<i>по неделям семестра</i>) Форма промежуточной аттестации (<i>по семестрам</i>)
				Лекция	Семинарские занятия	Контр. работа	Консультации	Самост. работа	Экзамен	
1	Теоретические методы исследования	8	1–8	16	14		7	28		
1.1	Атом в расчетных методах. Базисные функции.			2	2		1	4		
1.2	Молекула в расчетных методах. Приближение Борна–Опенгеймера. Приближение МО ЛКАО.			2	2		1	4		

	Уравнения Рутана.							
1.3	Теория функционала плотности.		2	2	1	4		
1.4	Топологические методы анализа электронной плотности. Концепция деформационной электронной плотности. Атом в молекуле		4	2	1	4		
1.5	Топологическая теория. Функция локализации электронной плотности (ELF)		2	2	1	4		
1.6	Релятивистские эффекты в химической связи.		2	2	1	4		
1.7	Расчет молекулярных свойств – энергий образования, молекулярных орбиталей, потенциалов ионизации.		2	2	1	4		
2	Теоретические основы спектроскопических методов исследования	8	8–15	14	16	6	24	
2.1	Ядерные переходы. Мёссбауровская спектроскопия.		2	2	1	4		
2.2	Переходы внутренних электронов атомов. Рентгеновская спектроскопия.		2	4	1	4		

2.3	Переходы валентных электронов.			2	2		1	4		
2.4	Колебательные переходы			2	4		1	4		
2.5	Переориентация ядерного или электронного спина.			4	2		1	4		
2.6	Магнетохимия. Электронное строение веществ.			2	2		1	4		
				30	30		13	68	3	Всего 144 час
										Экзамен

Рабочий план (по неделям семестра).
Весенний семестр

Неделя	Темы занятий
ФЕВРАЛЬ	
2-я неделя	Семинар 1. Атом в расчетных методах. Базисные функции. Программные комплексы: ADF, Gaussian, Jaguar, Siesta, Dirac04 и др.
3-я неделя	Семинар 2. Молекула в расчетных методах. Приближение Борна–Опенгей-мера. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана.
4-я неделя	Семинар 3. Электронная плотность. Теория функционала плотности.
МАРТ	
1-я неделя	Семинар 4. Метод функции локализации электронной плотности (ELF). Метод квантовой теории Р.Бейдера «Атом в молекулах» (QTAIM). Расчет в программных приложениях.
2-я неделя	Семинар 5. Характеристика межатомных взаимодействий при использовании методов ELF и QTAIM. Визуализация межатомных взаимодействий в программных комплексах.

3-я неделя	Семинар 6. Релятивистские эффекты в химии. Учет релятивистских эффектов в квантовохимических методах.
4-я неделя	Семинар 7. Расчет молекулярных свойств – энергий образования, молекулярных орбиталей, потенциалов ионизации.
АПРЕЛЬ 1-я неделя	Семинар 8. Мессбауэровская спектроскопия. Квантовохимические возможности расчета параметров спектроскопии Мессбауэра в химии.
2-я неделя	Семинар 9. Природа рентгеноэлектронных спектров. Квантово-химический расчет рентгеноэлектронных спектров.
3-я неделя	Семинар 10. Природа электронных спектров в видимой и ультрафиолетовой областях. Квантово-химический расчет электронных спектров.
4-я неделя	Семинар 11. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Квантово-химический расчет эффектов люминесценции.
5-я неделя	Семинар 12. Колебательная спектроскопия ИК и КР. Квантово-химический расчет спектров колебательной спектроскопии.
МАЙ 1-я неделя	Семинар 13. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Квантово-химический расчет ЯМР параметров.
2-я неделя	Семинар 14. Электрический квадрупольный момент ядер. Квантово-химический расчет ЯКР параметров.
3-я неделя	Семинар 15. Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Квантово-химический расчет магнитных параметров.

Программа курса лекций

Раздел I. Теоретические методы исследования

Расчет электронного строения молекул и кристаллов. Атом в расчетных методах. Базисные функции. Молекулярные орбитали. Гамильтониан взаимодействия. Метод самосогласованного поля. Полузэмпирические методы квантовой химии. Неэмпирические методы квантовой химии. Теория функционала плотности. Расчет молекулярных свойств - энергии образования, молекулярные орбиталей, потенциалы ионизации. Основы зонных расчетов. Релятивистские эффекты в химии.

Топологические методы квантовой химии. Электронная плотность. Метод функции локализации электронной плотности (ELF). Метод квантовой теории Р.Бейдера «Атом в молекулах» (QAIM). Химические связи и молекулярные графы. Циклы и клетки. Характеристика межатомных взаимодействий при использовании методов ELF и QAIM. Модели структурных изменений. Катастрофы.

Современные программные комплексы. ADF, Gaussian, Jaguar, Siesta, Dmol3, Diac04 и др.

Раздел II. Экспериментальные методы исследования

Теоретические основы спектроскопических методов исследования. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом - главный критерий отнесения физического метода анализа к спектроскопическому методу. Природа электромагнитного излучения, различные типы его взаимодействия с веществом. Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих спектральную область. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение линий в спектральной области, интенсивность и ширина линий, понятие о шумах).

Метод ЯГР. Мессбауэровская спектроскопия. γ -Резонансная ядерная флуоресценция, эффект Мессбауэра. Энергия испускаемых и поглощаемых γ -квантов. Доплеровское уширение и энергия отдачи. Процедура получения γ -резонансных спектров. Химический (изомерный) сдвиг, влияние химического окружения. Квадрупольные и магнитные взаимодействия. Возможности γ -резонансной спектроскопии в химии и ограничения ее применения.

Рентгенэлектронная спектроскопия – экспериментальная квантовая химия. Природа рентгеновских спектров. Классификация рентгеновских методов анализа. Анализ по первичному рентгеновскому излучению (рентгеноэмиссионный). Анализ по вторичному рентгеновскому излучению (рентгенофлуоресцентный). Рентгеноабсорбционный анализ. Природа критических краев поглощения. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (электронная спектроскопия для химического анализа - ЭСХА). Ожеэлектронная спектроскопия (внутренняя конверсия электронов). Квантово-химический расчет рентгеноэлектронных спектров.

Электронная спектроскопия в области УФ и видимого диапазона поглощения. Принцип Франка - Кондона. Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Определение энергии диссоциации и других молекулярных постоянных. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивности полос различных переходов. Правила

отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Квантово-химический расчет электронных спектров.

Люминесценция. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции). Закономерности люминесценции (закон Стокса - Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа. Квантово-химический расчет эффектов люминесценции.

Колебательная спектроскопия (ИК и КР). Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертонные и составные частоты. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и спектрах КР. Квантово-химический расчет спектров колебательной спектроскопии.

Метод ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг. Константа экранирования ядра. Спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Диполь-дипольные взаимодействия. Двух- трехспиновые системы. Квадрупольные взаимодействия. Первый и второй порядок теории возмущения. Анализ структурных свойств на основе метода ЯМР. Молекулярная подвижность. Магнитный резонанс в металлах. Квантово-химический расчет ЯМР параметров.

Метод ЯКР. Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем. Градиент поля на ядре. Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля. Параметр асимметрии поля и уровни энергии. Квантово-химический расчет ЯКР параметров.

Магнетохимический метод исследования. Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость вещества. Классификация магнитных явлений. Диамagnetизм. Парамагнетизм. Ферромагнетизм. Антиферромагнетизм. Ферримагнетизм. Идеальный диамагнетизм (сверхпроводимость). Квантовомеханический подход к описанию парамагнитного поведения системы. Законы Кюри и Кюри-Вейса. Магнитный момент парамагнитных систем. Магнитные свойства неорганических соединений и комплексов переходных металлов. Магнитные свойства растворов. Измерение

магнитной восприимчивости. Квантово-химический расчет магнитной восприимчивости.

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий. Преподавание курса ведется в виде чередования лекций, семинарских занятий и консультаций. Самостоятельные занятия в основном построены на практическом усвоении лекционного материала: студентам предлагается освоить программный комплекс ADF (Amsterdam Density Functional, <https://www.scm.com/>). Для этого предлагается рассчитать электронное строение и физико-химические свойства молекулярного комплекса. Молекулярный комплекс студент должен придумать исключительно самостоятельно, но комплекс не должен быть шаблонным, а построенным на реальных объектах, приближенных к практике научных исследований.

Каждое семинарское занятие содержит элементы диалога преподавателя со студентами, поскольку каждый из участников – студенты или преподаватель имеют право задавать вопросы в ходе решения задачи и участвовать в ее разборе. Таким образом, на семинарских занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

В случае возникновения у студента трудностей с усвоением лекционного материала предусмотрены также индивидуальные занятия во внеучебное время.

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

Формой текущего контроля при прохождении дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии» является посещение студентом лекций. Для того чтобы быть допущенным к экзамену, студент должен посетить не менее 80 % лекций. Отсутствие возможно только по уважительным причинам.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины. При подготовке к лекциям и самостоятельным работам студенты могут использовать рекомендованные преподавателем литературные источники и Интернет-ресурсы, а также любую доступную справочную литературу.

Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы

1. Расшифруйте обозначения HF, UHF, DFT, MP2.
2. Расшифруйте обозначения 6-311G**, TZP, TZ2P, DZ.

3. Расшифруйте обозначения B3LYP, BLYP, Becke&Perdew.
4. Расшифруйте обозначения HF/6-311G**, B3LYP/4-311G, MP2/6-31G(3d) // HF/STO-3G.
5. Рассчитайте энталпию образования соединения.
6. Что позволяет анализировать метод ELF?
7. Что позволяет анализировать метод AIM?
8. Типы критических точек теории Бейдера. В чем их смысл?
9. Понятие катастрофа при анализе электронных свойств молекулярных систем.
10. Охарактеризуйте шкалу частот и энергий электромагнитных колебаний.
11. Основные принципы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.
12. Основные принципы Оже-электронной спектроскопии.
13. Прокомментируйте возможные изменения рентгенофотоэлектронного спектра при изменении температуры образца от комнатной до температуры жидкого азота?
14. Принципы расчета электронных спектров?
15. В чем состоит эффект Мессбауэра? Охарактеризуйте понятие – химический сдвиг в ЯГР.
16. Чем объясняется окраска веществ и материалов и связь с квантовой химией?
17. Чем отличается фосфоресценция от флюoresценции?
18. Правила отбора для спектров инфракрасной спектроскопии.
19. Правила отбора для спектров рамановской спектроскопии.
20. Как рассчитывается спектры колебательной спектроскопии при помощи программ квантовой химии?
21. Правила отбора для спектров ядерного магнитного резонанса.
22. Что такое гиromагнитное отношение магнитных ядер?
23. Чем вызван химический сдвиг в ЯМР?
24. Чем обусловлена природа косвенных спин-спиновых взаимодействий?
25. Чем обусловлена природа магнитных диполь-дипольных взаимодействий?
26. Как рассчитываются химические сдвиги ЯМР при помощи программ квантовой химии?
27. Основные принципы ядерного квадрупольного резонанса.
28. Как рассчитываются константы квадрупольной связи при помощи программ в квантовой химии?
29. Основные принципы электронного парамагнитного резонанса.
30. Охарактеризуйте понятие g - Фактора Ланде.
31. Как рассчитываются значения g - факторов при помощи программ квантовой химии?
32. Какие магнитные явления Вы знаете?

33. Что такое эффективный магнитный момент?
34. В соединении эффективный магнитный момент равен 2.89 м.Б. и не зависит от температуры. Что можно сказать о валентном состоянии парамагнитного атома?

Требования к экзамену

1. Придумать молекулу/кластер (система) для самостоятельного исследования.
2. Рассчитать электронное строение системы (энергию образования, схему расположения молекулярных орбиталей, энергетическую щель между верхней заполненной и нижней свободной молекулярными орбиталями, определить тип связывания в молекулярных орбиталях).
3. Провести анализ химического связывания методами ELF и QTAIM.
4. Рассчитать параметры системы для физического метода (на выбор студента) и сопоставить с экспериментальными данными.
5. Оформить полученные результаты (пп.1-4) в виде реферата и сдать лектору курса.

Все пункты (1-5) оцениваются по 10 балльной шкале. 50 баллов - максимум. Набор от 75 до 85 % баллов влечет оценку «хорошо», 85 % и выше – «отлично».

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика: Нерелятивистская теория 3 т.М.: Наука, 1974.
2. М. Дяткина. Основы теории молекулярных орбиталей. М. Наука. 1975г.
3. Д. Слетеर. Электронная структура молекул. М.:Мир, 1965. 585 с.
4. Р. Ф. Бейдер. Атомы в молекулах. (Квантовая теория). Из-во М.: Мир, 2001.
5. Р.Нокс, А. Голд. Симметрия в твердом теле. М.:Наука, 1970, 424с.
6. Р.Драго Физические методы в химии: В 2 т. М.: Мир, 1981. Т. 1, 2.
7. С.П. Габуда, С.Г. Козлова. Неподеленные электронные пары и химическая связь в молекулярных и ионных кристаллах. Из-во СО РАН, 2009, 164 с.

Дополнительная литература:

1. Н.П. Грицан. Квантовая химия. Часть 1. Основы теории. Курс лекций. Из-во. НГУ. 2001, 144 с.

2. А.Г. Сtronберг. Физическая химия: Учеб. для хим. спец. Вузов. 5-е издание. – М.: Высш. Шк., 2003. – 527 с.
3. И.Б. Берсукер. Электронное строение и свойства координационных соединений. Из-во: Химия. Ленинград. 1976.
4. В.И. Нефедов, В.И. Вовна. Электронная структура химических соединений. М.: Наука, 1987 г. 345 с.
5. Л.Н. Мазалов. Рентгеновские спектры и химическая связь. Новосибирск: Наука. 1982, 109 с.
6. Г. Верхейм. Эффект Мессбауэра. М.: Мир, 1966. 250 с.
7. Э. Ливер. Электронная спектроскопия неорганических соединений. В 2-х частях. М.: Мир, 1987 г.
8. Л.А.Грибов. Введение в молекулярную спектроскопию. М.:Наука, 1976.
9. М.М. Сущинский. Спектры комбинационного рассеяния молекул и кристаллов. Из-во: Наука, 1969, 576 с.
10. Ч. Сликтер. Основы теории магнитного резонанса. Из-во М.: Мир, 1981.
11. А. Керрингтон, Э. Мак-Лечлан. Магнитный резонанс и его применение в химии: Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 447 с.
12. Г.К. Семин Т.А., Бабушкина, Г.Г.Якобсон. Применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л.: Химия, 1972. 536 с.
13. С.П.Габуда, А.Г.Лундин. Внутренняя подвижность в твердом теле. Новосибирск, Наука. 1986.
14. С.П.Габуда, Р.Н. Плетнев. Применение ЯМР в химии твердого тела. Из-во: Екатеринбург., 1996, 467 с.
15. Ж. Винтер. Магнитный резонанс в металлах. М.: Мир, 1976, 288с.
16. Я.Г. Дорфман Диамагнетизм и химическая связь. - М.: Физматгиз, 1961. 231с.
17. В.Т.Калинников, Ю.В. Ракитин. Введение в магнетохимию. М.: Наука, 1980.
18. П.Селвуд. Магнетохимия. - М.: ИЛ, 1958. 458 с.
19. Л.В.Вилков, Ю.А. Пентин. Физические методы исследования в химии. Москва, «Высш. школа», 1987.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- В качестве технического обеспечения лекционного процесса используется ноутбук, мультимедийный проектор, доска.
- Для демонстрации иллюстрационного материала используется программа Microsoft Power Point.

- Для проведения квантовохимических расчетов каждому студенту предоставляется возможность работы в режиме отдаленной компьютерной связи с вычислительными ресурсами Института неорганической химии СО РАН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятых в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ».

Автор: Козлова Светлана Геннадьевна, д.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры неорганической химии ФЕН, зав.лаб. ИНХ СО РАН

Программа одобрена на заседании кафедры неорганической химии
27 мая 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н.  Д.Г. Самсоненко