ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УТВЕРЖДАЮ
Директор, д.х.н.
_____А.В. Иванов
«04» марта 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВ

Шифр и наименование области науки:
1. Естественные науки

Шифр и наименование группы научных специальностей:
1.4. Химические науки

Шифр и наименование научных специальностей:
1.4.3. Органическая химия
1.4.4. Физическая химия
1.4.7. Высокомолекулярные соединения
1.4.8. Химия элементоорганических соединений

Иркутск
2022

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов), утвержденными Приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 и Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденным Постановлением Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122.

Рабочая программа составлена д.ж.н., доц. Суслович Д.С.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН (Протокол № 2 от « 28 » февраля 2022 г.)

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Цель изучения дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ»: приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области применения физико-химических методов исследования и в смежных областях науки. Формирование компетенций в области основных физико-химических методов установления состава и строения органических соединений, формирование навыков самостоятельной работы с приборной и аналитической базой физико-химических методов анализа, компьютерным парком и он-лайн базами данных.

Задачи:

- формирование представлений об физико-химических методах изучения структуры веществ;
- ознакомление с основами важнейших современных физико-химических методов анализа;
- формирование навыков и умений получения и интерпретации данных физико-химических методов анализа (УФ, ИК- ЯМР, масс-), установления строения органических и элементоорганических соединений по совокупности данных инструментальных методов.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Физико-химические методы исследования структуры веществ» является частью образовательного компонента (Подраздел 2.1.3.1. (Ф) раздела 2.1.3. (Ф) «Факультативы») программ аспирантуры по научным специальностям:

- 1.4.3. Органическая химия;
- 1.4.4. Физическая химия;
- 1.4.7. Высокомолекулярные соединения;
- 1.4.8. Химия элементоорганических соединений.

Учебная дисциплина реализуется (по выбору аспирантов) на первом году обучения.

Знания, умения и навыки, приобретенные аспирантами по результатам изучения учебной дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ», используются ими для сдачи кандидатского экзамена и при написании диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата наук.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

Знать:

- теоретические и методологические основы физико-химических методов изучения структуры веществ;
- принципы, условия и методологию применения физико-химических методов на практике;
- возможности тех или иных физико-химических методов в установлении структуры органических и элементоорганических соединений.

Уметь:

- выбирать необходимые и оптимальные методы для установления структуры органических и элементоорганических соединений;
- проводить разделение смесей органических или элементоорганических веществ, идентификацию их состава и определять строение с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- осуществлять поиск методов идентификации и информации о структурных параметрах органических и элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем.

Иметь опыт:

- работы на современном научном оборудовании для физико-химических исследований органических и элементоорганических соединений;
- моделирования структурных параметров органических и элементоорганических веществ с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей.

4. Структура и содержание учебной дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы (108 часов).

Структура дисциплины

Таблица 4.1. Структура учебной дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Форма контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				СР	
				Лек	Лаб	П	КСР		
1	Физико-химические методы исследования структуры веществ	108	27	18	-	9	-	81	Зачет

Содержание дисциплины

Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов определения структуры веществ.

Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы.

Тема 2. Масс-спектрометрия.

Принципы масс-спектрометрии. Методы ионизации. Применение масс-спектрометрии.

Тема 3. Спектроскопические методы исследования.

Природа электромагнитного излучения. Основные характеристики излучения. Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы. Спектры испускания, поглощения и рассеяния.

Тема 4. Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света.

Квантово-механический подход к описанию колебательных спектров. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа. ИК-спектроскопия твердых тел.

Тема 5. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах.

Тема 6. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция).
Основные характеристики люминесценции. Закономерности люминесценции.

Тема 7. Рентгеновские методы исследования.
Природа рентгеновских спектров. Классификация рентгеновских методов анализа.

Тема 8. Методы исследования оптически активных веществ.
Дисперсия оптического вращения. Оптический круговой дихроизм.

Тема 9. Резонансные методы.
Метод ЯМР. Метод ЭПР.

Разделы дисциплины и виды занятий

Таблица 4.2. Разделы дисциплины и виды занятий с указанием трудоемкости

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лек	Лаб	П	СР	КСР	
1	Общая характеристика и классификация физико-химических методов определения структуры веществ.	12	2	-	1	9	-	Собеседование
2	Масс-спектрометрия.	12	2	-	1	9	-	
3	Спектроскопические методы исследования.	12	2	-	1	9	-	
4	Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света.	12	2	-	1	9	-	
5	Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.	12	2	-	1	9	-	
6	Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция).	12	2	-	1	9	-	
7	Рентгеновские методы исследования.	12	2	-	1	9	-	
8	Методы исследования оптически активных веществ.	12	2	-	1	9	-	
9	Резонансные методы.	12	2	-	1	9	-	
Всего часов:		**108**	**18**	**-**	**9**	**81**	**-**	

Рабочей программой дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ» предусмотрена самостоятельная работа обучающегося в объеме 81 ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Перечень рекомендуемых видов самостоятельной работы:

- регулярная проработка пройденного на лекциях учебного материала по разделам курса;

- ознакомление с литературой в электронно-библиотечных системах, включая публикации из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок, семинаров, конференций различного уровня;

- участие в семинарах ИрИХ СО РАН по тематике курса, научно-методических семинарах лабораторий, посещение защит диссертаций на соискание ученой степени кандидата и доктора наук;

- подготовка к сдаче зачета по курсу.

5. Организация текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения учебной дисциплины

Текущий контроль по дисциплине «Физико-химические методы исследования структуры веществ» осуществляется в следующих формах: собеседование по контрольным вопросам.

Собеседование – средство контроля, организованное в форме собеседования по тематике изучаемой дисциплины, рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по всем изученным разделам, темам; свободного использования терминологии для аргументированного выражения собственной позиции.

Собеседование по контрольным вопросам и письменным ответам на вопросы оценивается в соответствии со следующими критериями: аргументированность позиции, широта используемых теоретических знаний.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Физико-химические методы исследования структуры веществ» проводится на первом году обучения в форме зачета, предусматривающего ответы на контрольные вопросы.

Зачет – средство, позволяющее получить экспертную оценку знаний, умений и навыков, полученных по итогам изучения дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ».

Критерии оценивания ответа аспиранта:

- для оценки «зачтено»: наличие твердых и достаточно полных знаний программы курса, незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач, четкое изложение материала;

- для оценки «не зачтено»: наличие грубых ошибок в ответе, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике, неуверенность и неточность ответов на дополнительные и наводящие вопросы.

Дисциплина считается освоенной, если обучающийся получил оценку «зачтено».

Оценочные средства для проведения текущего контроля

Примеры контрольных вопросов для проведения собеседования

1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов определения структуры веществ.
2. Классификация рентгеновских методов анализа.
3. Метод ЭПР.
4. Масс-спектрометрия.
5. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа.
6. Основные характеристики люминесценции.
7. Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света.
8. Симметрия и номенклатура электронных состояний.
9. Принципы масс-спектрометрии.
10. Электронная спектроскопия.

11. Квантово-механический подход к описанию колебательных спектров.
12. Резонансные методы.
13. Природа электромагнитного излучения.
14. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул.
15. Метод ЯМР.
16. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах.
17. Дисперсия оптического вращения.
18. Колебательные переходы.
19. Природа рентгеновских спектров.
20. Применение масс-спектрометрии.
21. Электронные переходы.
22. Рентгеновские методы исследования.
23. Флуоресценция.
24. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы.
25. Электронная спектроскопия.
26. Закономерности люминесценции.
27. Методы исследования оптически активных веществ.
28. Оптический круговой дихроизм.
29. Классификация и отнесение электронных переходов.
30. Основные характеристики излучения.
31. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.
32. Методы ионизации.
33. Методы исследования оптически активных веществ
34. Масс-спектрометрия.
35. ИК-спектроскопия твердых тел.
36. Вращательные переходы.
37. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
38. Фосфоресценция.
39. Спиновые и ядерные переходы.
40. Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света.
41. Люминесценция.
42. Спектры испускания и поглощения.
43. Спектроскопические методы исследования.
44. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.
45. Спектры рассеяния.

Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Контрольные вопросы к зачету

1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов определения структуры веществ.

Методы определения физических свойств. Общая характеристика и классификация методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов.

2. Масс-спектрометрия

Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Отношение массы к заряду. Масс-спектр. Молекулярные предшественники. Стабильные и метастабильные ионы. Фрагментация. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация. Ионный ток и сечение ионизации. Разрешающая сила масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Определение парциальных давлений компонентов газовых смесей. Эффузионная ячейка Кнудсена. Определение теплоты сублимации, теплоты реакции и константы равновесия.

3. Спектроскопические методы исследования

Природа электромагнитного излучения, Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий. Спектры испускания, поглощения и рассеяния. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина). Принципиальная схема спектроскопических измерений в любой области спектра. Основные узлы спектральной установки. Источники электромагнитного излучения.

4. Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света

Квантово-механический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертонные и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Стоксовы и антистоксовы линии КР. Определение геометрических параметров неполярных молекул. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекулы. Характеристичность нормальных колебаний. Определение силовых полей молекулы. Использование изотопозамещенных молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. ИК-спектроскопия твердых тел. Спектры пропускания, диффузного рассеяния, нарушенного полного внутреннего отражения, испускания. ИК-Фурье-спектроскопия, Фурье преобразование, выигрыши Жакино, Фелджета, Конна.

5. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях

Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Принцип Франка-Кондона. Определение энергии диссоциации и других молекулярных постоянных. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. 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. Хромофоры. Спектры сопряженных систем и пространственные

эффекты в электронных спектрах поглощения.Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

6. 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). Синглетные и триплетные состояния. Закономерности люминесценции (закон Стокса-Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа.

7. Рентгеновские методы исследования

Природа рентгеновских спектров. Края поглощения. Взаимосвязь рентгеновских спектров поглощения и характеристических спектров испускания. Зависимость частоты перехода краев поглощения или линий испускания от величины порядкового номера элемента (закон Мозли). Классификация рентгеновских методов анализа. Анализ по первичному рентгеновскому излучению (рентгеноэмиссионный). Анализ по вторичному рентгеновскому излучению (рентгенофлуоресцентный). Закон Брэгга-Вульфа. Рентгено-абсорбционный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (электронная спектроскопия для химического анализа - ЭСХА). Метод ЭСХА как непосредственный экспериментальный метод измерения величины энергии химической связи. Возможности ЭСХА для анализа поверхностей. Оже-электронная спектроскопия, возможности ОЭС для анализа легких элементов. Синхротронное излучение и методы XAFS (EXAFS, XANES). Исследование координации и природы ближайшего окружения атомов.

8. Методы исследования оптически активных веществ

Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона - аномальная дисперсия. Схема эксперимента. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ. Правило октантов.

Оптический круговой дихроизм. Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.

9. Резонансные методы

Метод ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Метод двойного резонанса. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров.

Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. ***g***-Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при

взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Использование спиновых меток. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности эксперимента, достоинства и ограничения метода.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Анализ органических и элементоорганических соединений; учеб.-метод. пособие / сост.: Г. Б. Недвецкая, Л. П. Шаулина, А. А. Татаринова, Т. В. Мамасева. – Иркутск: ИГУ, 2014. – 93 с.
2. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
3. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.

Дополнительная литература

1. Илиел, Э. Основы органической стереохимии / Э. Илиел. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 703 с.
2. Кленин, В. И. Высокомолекулярные соединения / В. И. Кленин, И. В. Федусенко. – М.: Лань, 2013. – 512 с.
3. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
4. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
5. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
6. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
7. Смит, В. А. Основы современного органического синтеза. Учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.
8. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 1 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 368 с.
9. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 2 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 517 с.
10. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 3 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 388 с.
11. Хельвинкель, Д. Систематическая номенклатура органических соединений / Д. Хельвинкель. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 232 с.
12. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.

Электронные ресурсы

1. Базыль, О.К. Введение в курс «Физические методы исследования в химии» [Электронный ресурс]: учебное пособие / О.К. Базыль. — Электрон. дан. — Томск: ТГУ, 2016. — 132 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/91951. — Загл. с экрана.

2. Белащенко, Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии. Лабораторный практикум [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.К. Белащенко. — Электрон. дан. — Москва: МИСИС, 2012. — 109 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/47442. — Загл. с экрана.
3. Галактионова, А.С. Анализ органических соединений [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.С. Галактионова, Г.А. Жолобова, И.Л. Филимонова, М.С. Юсубов. — Электрон. дан. — Томск: СибГМУ, 2013. — 88 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/105846. — Загл. с экрана.
4. Жебентяев, А.И. Аналитическая химия. Хроматографические методы анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.И. Жебентяев. — Электрон. дан. — Минск: Новое знание, 2013. — 206 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/64909. — Загл. с экрана.
5. Каратаева, Е.С. Теоретические основы газовой хроматографии [Электронный ресурс]: монография / Е.С. Каратаева. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2015. — 268 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/102099. — Загл. с экрана.
6. Лефедова, О.В. Молекулярная спектроскопия [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / О.В. Лефедова, С.А. Шлыков. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2016. — 95 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/96110. — Загл. с экрана.
7. Суханов, П.П. Анализ многокомпонентных полимерных систем методами ЯМР. Часть II. Олигомер–полимерные превращения [Электронный ресурс]: монография / П.П. Суханов. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2006. — 269 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/13264. — Загл. с экрана.
8. Сычев, С.Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем [Электронный ресурс]: учебное пособие / С.Н. Сычев, В.А. Гаврилина. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2013. — 256 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/5108. — Загл. с экрана.

Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы из библиотечного фонда ИрИХ СО РАН:

1. Вестник Российской академии наук.
2. Высокомолекулярные соединения. Серия А: Физика полимеров.
3. Высокомолекулярные соединения. Серия Б: Физика полимеров.
4. Доклады академии наук.
5. Журнал общей химии.
6. Журнал органической химии.
7. Журнал прикладной химии.
8. Журнал структурной химии.
9. Известия Академии наук. Серия химическая.
10. Успехи химии (электронный журнал).
11. Химико-фармацевтический журнал.
12. Химия в интересах устойчивого развития.
13. Химия гетероциклических соединений.
14. Электрохимия.
15. Journal of Sulfur Chemistry.
16. Mendeleev Communications.

Электронно-библиотечные системы профессиональные базы данных, информационные справочные и поисковые системы:

1. Химическая реферативная служба Американского химического общества CAS SciFinder https://sso.cas.org/

2. База данных Elsevier: Reaxys+Reaxys Medicinal Collection https://www.reaxys.com/.
3. The Cambridge Crystallographic Data Centre: база данных CSD-Enterprise https://www.ccdc.cam.ac.uk/
4. База данных медицинских и биологических публикаций PubMed https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/.
5. База данных Академия Google https://scholar.google.ru/.
6. Федеральный институт промышленной собственности http://www1.fips.ru.
7. Федеральная служба по интеллектуальной собственности http://www.rupto.ru.
8. The United States Patent and Trademark Office http://www.uspto.gov.
9. The European Patent Office http://ep.espacenet.com.
10. Academic Reference – база данных полнотекстовых англоязычных ресурсов по всем академическим дисциплинам, опубликованных в Китае https://ar.cnki.net.
11. База цитирования Elsevier B.V.: Scopus https://www.scopus.com.
12. База цитирования РИНЦ https://www.elibrary.ru/.
13. База данных электронно-библиотечной системы «Лань» https://e.lanbook.com/.
14. Ресурсы удаленного доступа и базы данных ФГБУН Государственной публичной научно-технической библиотеки СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/.
15. Электронно-библиотечная система Центральной научной библиотеки ИНЦ СО РАН (на базе АИБС «Ирбис») http://csl.isc.irk.ru/.
16. Elsevier: Science Direct Complete Freedom Collection https://www.elsevier.com/, http://www.sciencedirect.com.
17. George Thieme Verlag: коллекция журналов Thieme по химии https://www.thieme.com/.
18. Royal Society of Chemistry: база данных RSC DATABASE https://www.rsc.org/.
19. Wiley: Коллекция журналов Database Collection https://onlinelibrary.wiley.com/.
20. Справочно-правовая система "ГАРАНТ" https://internet.garant.ru/ .
21. Сайт ВАК Минобрнауки РФ https://vak.minobrnauki.gov.ru/.
22. Электронная информационно-образовательная среда ИрИХ СО РАН http://eios-irich.com.ru/moodle/.

Бесплатные официальные открытые ресурсы Интернет:

1. Directory of Open Access Journals (DOAJ) http://doaj.org/
   Ресурс объединяет более 10000 научных журналов по различным отраслям знаний (около 2 миллионов статей) из134 стран мира.
2. Directory of Open Access Books (DOAB) https://www.doabooks.org/
   В базе размещено более 3000 книг по различным отраслям знаний, предоставленных 122 научными издательствами.
3. BioMed Central https://www.biomedcentral.com/
   База данных включает более 300 рецензируемых журналов по биомедицине, медицине и естественным наукам. Все статьи, размещенные в базе, находятся в свободном доступе.
4. Электронный ресурс arXiv https://arxiv.org/
   Крупнейшим бесплатный архив электронных научных публикаций по разделам физики, математики, информатики, механики, астрономии и биологии. Имеется подробный тематический каталог и возможность поиска статей по множеству критериев.
5. Коллекция журналов MDPI AG http://www.mdpi.com/
   Многодисциплинарный цифровой издательский ресурс, является платформой для рецензируемых научных журналов открытого доступа, издающихся MDPI AG (Базель, Швейцария). Издательство выпускает более 120 разнообразных электронных журналов, находящихся в открытом доступе.
6. Издательство с открытым доступом InTech http://www.intechopen.com/
   Первое и крупнейшее в мире издательство, публикующее книги в открытом доступе, около 2500 научных изданий. Основная тематическая направленность - физические и технические науки, технологии, медицинские науки, науки о жизни.
7. База данных химических соединений ChemSpider http://www.chemspider.com/

ChemSpider – это бесплатная химическая база данных, предоставляющая быстрый доступ к более чем 28 миллионам структур, свойств и соответственной информации. Ресурс принадлежит Королевскому химическому обществу Великобритании (Royal Society of Chemistry).

8. Коллекция журналов PLOS ONE http://journals.plos.org/plosone/
   PLOS ONE – коллекция журналов, в которых публикуются отчеты о новых исследованиях в области естественных наук и медицины. Все журналы размещены в свободном доступе (Open Access), все статьи проходят строгое научное рецензирование.

7. Материально-техническое обеспечение научно-исследовательской работы

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Физико-химические методы исследования структуры веществ» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

Для реализации образовательного процесса в форме лекций и практических занятий используются следующие помещения: универсальная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; малый лекционный зал (библиотека), оснащенный компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет, учебной мебелью и демонстрационным оборудованием.

Для освоения программы обучения и для выполнения практических и научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют диссертационные работы (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Программное обеспечение:

Лицензионные продукты:

- Microsoft Office 2010 Russian Academic Open;
- Microsoft Office Professional 2010 Russian Academic Open;
- Zoom – система видеоконференцсвязи с возможностью обмена сообщениями и передачей контента в режиме реального времени.

Свободно распространяемое ПО: браузер Google Chrome67, Mozilia Firefox 60.02, Opera53; Pascal ABC 3.3; система текстовой, голосовой и видеосвязи связи Skype7.41.0.101; программа для создания электронных учебных продуктов Moodle 3.2.; программа для просмотра электронных документов Foxit PDF Reader 9.1.0.5096; архиватор 7zip 17.01 beta.

Приборная база:

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультиядерных Фурье-спектрометра ЯМР (DPX 400 и AVANCE 400), рентгеновский дифрактометр Bruker D8 ADVANCE, рентгеновский дифрактометр D2 PHASER, инфракрасный Фурье-спектрометр Vertex 70 с Раман приставкой, инфракрасный Фурье-спектрометр Excalibar HE 3100 Varian, микроанализатор Flash EA 1112 CHN-O/MAS 200, микроанализатор Termo Flash EA 2000 CHNS, ЭПР-спектрометр ELEXSYS E580, установка наносекундного импульсного фотолиза, хроматомасс-спектрометр QP-5050A, хроматомасс-спектрометр Agilent 5975 с химической ионизацией, тандемный TOF/TOF масс-спектрометр Ultra Flex, электронный микроскоп TM 3000 Hitachi, спектрофлуориметр FLPS920 Edinburg Instruments, УФ/ВИД-спектрометр LAMBDA 35 и диэлькометр.

Для проведения квантово-химических расчетов имеются компьютеры в лабораториях и вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб.

Лицензионное программное обеспечение, встроенное в соответствующие приборные комплексы, являющееся его неотъемлемой частью, обеспечивающей функционирование приборов:

- Gaussian 09, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул.
- Apex 2, Apex 3, Программы для обработки данных монокристального дифрактометра;
- CCDC (ConQuest, Mercury, DASH, Mogul, Hermes), Кристаллографическая база данных и пакет программ для работы с базой данных;
- TurboMol, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул;
- XWinNMR, Программа для записи и обработки данных спектрометра ЯМР;
- TOPAS, EVA, Программы для обработки данных порошкового дифрактометра;
- PDF-2, База данных порошковых дифрактограм неорганических соединений;
- ResolutionsPro Opus, Пакет программ, для записи и обработки ИК-спектров;
- Lambda35, Программа для записи и обработки УФ-спектров;
- Программа Flexanalysis 3.3 для обработки массива данных по биополимерам, нелетучих биомакромолекул, олигомерам, синтетическим полимерам, солям и нелетучих веществ;
- Xepr, XSophe, XeprView, Пакет программ для записи и обработки спектров ЭПР.

  С открытой лицензией:
- Dalton2016, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций;
- DIRAC, программа для атомных и молекулярных прямых итеративных релятивистских вычислений на всех электронах, вычислений молекулярных свойств с использованием релятивистских квантово-химических методов;
- ORCA software, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций.