

Перечень методик Центра коллективного пользования «Центр исследования строения молекул» ИНЭОС РАН

№ п/п	Наименование методики	Содержание методики	Методика аттестована (да/нет)
1	2	3	4
1.	Методика измерений структурных характеристик кристаллических материалов методом рентгеновской дифракции	Методика решает задачу определения параметров элементарной ячейки, координат атомов и как следствие кристаллической структуры. Результатом выполнения задачи является кристаллографический информационный файл и описание эксперимента.	нет
2.	Методика определения параметров элементарной ячейки и микроструктуры мелкокристаллических образцов	Методика решает задачу определения параметров элементарной ячейки и размеров кристаллита образца представляющего собой мелкий порошок. Результатом выполнения задачи является получение численных значений указанных параметров с величиной ошибок и текстовое описание эксперимента.	нет
3.	Методика рентгенофазового анализа фармацевтически активных субстанций и готовых лекарственных форм	Методика решает задачу определения количества фаз и их параметров образца представляющего собой мелкий порошок. Результатом выполнения задачи является получение данных о кристаллических и аморфных фазах с определением их параметров и текстовое описание эксперимента.	нет
4.	Методика определения элементов методом рентгенофлуорисцентной спектрометрии в ЭОС.	Метод РФА является быстрым и универсальным методом качественного и количественного определения всех элементов тяжелее магния без деструкции вещества. Особенно метод эффективен при анализе образцов многоэлементного состава, совместное определение которых затруднено в химическом анализе.	нет

5.	Методика спектрофотометрического определения гетероэлементов (бора, кремния, фосфора, фтора) в ЭОС.	Методика является достаточно универсальной и отвечает след. требованиям элементного анализа органических соединений: высокая чувствительность, большая избирательность, позволяющая проводить определение одного или нескольких элементов в присутствии большого числа других элементов и высокая воспроизводимость результатов..	нет
6	Методика измерения ИК-спектра для прессовки в КВг	Методика представляет собой метод пробоподготовки для твердого образца. Образец в количестве (1-3 мг) растирается в ступе с 150 мг чистого бромида калия, переносится в специализированную вакуумную пресс-форму, далее на которую при вакуумной откачке накладывается давление 15-25 бар в гидравлическом прессе. Результатом методики является регистрация ИК-спектра пропускания в средней ИК-области для твердого образца в виде таблетки в КВг.	нет
7	Методика измерения НПВО ИК-спектра	Методика заключается в способе регистрации ИК-спектра для пленок и твердых образцов, не поддающиеся растиранию в ступке с помощью специальной НПВО приставки с алмазным или Ge-элементом при этом осуществляется механический контакт поверхности образца с НПВО-элементом. После регистрации спектра производится НПВО-коррекция. Медика позволяет зарегистрировать ИК-спектр любого твердого вещества, включая глубоко окрашенного. При использовании алмазной НПВО-приставки и дополнительных аксессуаров возможно зарегистрировать спектры к дальней ИК-области.	нет
8	Методика КР-микротопографирования	Методика заключается в регистрации серии КР спектров с поверхности образца заданной площади с пространственным разрешением до 1 мкм в автоматическом или ручном режиме. При этом пробоподготовка не производится. Результатом методики является карта, построенная на основе изменения интенсивности или сдвига линий в зарегистрированных КР спектрах, что позволяет	нет

		изучить гетерогенность образца, выявить наличие и распределение по площади тех или иных компонент, или распределения структурных особенностей образца.	
9	Методика ИК-микрочартографирования	Методика заключается в регистрации серии ИК спектров с поверхности образца заданной площади с пространственным разрешением до 20 мкм в автоматическом или ручном режиме. Осуществляется пробоподготовка, заключающаяся в нанесении тонкой пленки (1-3 мкм) образца на полированную металлическую поверхность или ИК-прозрачную пластину (KBr, KRS-5, SeZn, CaF ₂ или BaF ₂). Результатом методики является карта, построенная на основе изменения интенсивности или сдвига линий в зарегистрированных ИК-спектрах, что позволяет изучить гетерогенность образца, выявить наличие и распределение по площади тех или иных компонент, или распределения структурных особенностей образца.	нет
10	Методика измерения ИК-спектра для прессовки в KBr	Методика представляет собой метод пробоподготовки для твердого образца. Образец в количестве (1-3 мг) растирается в ступе с 150 мг чистого бромида калия, переносится в специализированную вакуумную пресс-форму, далее на которую при вакуумной откачке накладывается давление 15-25 бар в гидравлическом прессе. Результатом методики является регистрация ИК-спектра пропускания в средней ИК-области для твердого образца в виде таблетки в KBr.	нет
	Методика измерения НПВО ИК-спектра	Методика заключается в способе регистрации ИК-спектра для пленок и твердых образцов, не поддающиеся растиранию в ступке с помощью специальной НПВО приставки с алмазным или Ge-элементом при этом осуществляется механический контакт поверхности образца с НПВО-элементом. После регистрации спектра производится НПВО-коррекция. Методика позволяет зарегистрировать ИК-спектр любого твердого вещества, включая глубоко окрашенного. При использовании алмазной НПВО-	нет

		приставки и дополнительных аксессуаров возможно зарегистрировать спектры к дальней ИК-области.	
11	Методика КР-микрокартографирования	Методика заключается в регистрации серии КР спектров с поверхности образца заданной площади с пространственным разрешением до 1 мкм в автоматическом или ручном режиме. При этом пробоподготовка не производится. Результатом методики является карта, построенная на основе изменения интенсивности или сдвига линий в зарегистрированных КР спектрах, что позволяет изучить гетерогенность образца, выявить наличие и распределение по площади тех или иных компонент, или распределения структурных особенностей образца.	нет
12	Методика ИК-микрокартографирования	Методика заключается в регистрации серии ИК спектров с поверхности образца заданной площади с пространственным разрешением до 20 мкм в автоматическом или ручном режиме. Осуществляется пробоподготовка, заключающаяся в нанесении тонкой пленки (1-3 мкм) образца на полированную металлическую поверхность или ИК-прозрачную пластину (KBr, KRS-5, SeZn, CaF ₂ или BaF ₂). Результатом методики является карта, построенная на основе изменения интенсивности или сдвига линий в зарегистрированных ИК-спектрах, что позволяет изучить гетерогенность образца, выявить наличие и распределение по площади тех или иных компонент, или распределения структурных особенностей образца.	нет
13	Методика получения и анализа спектра ЯМР ¹ H для определения структуры и исследования физико-химических свойств широкого круга органических и элементоорганических соединений, в том числе функциональных и гибридных новых материалов различной химической природы, гомогенных и гетерогенных катализаторов, сенсоров, магнитных материалов,	Методика решает задачу структурного определения общего количества и положений ядер ¹ H в структуре исследуемого соединения. Результатом выполнения задачи является получение и интерпретация спектра ЯМР ¹ H с подтверждением или опровержением предполагаемой структуры продукта, определением чистоты и/или изомерного состава.	нет

	<p>нанокompозитов, фармcубcтанций и потенциалных медицинcких и фармпрепаратов, соединений, обладающих биологической активностью, стимуляторов и ингибиторов роста растений, хелаторов радиоактивных изотопов, магнитных медицинcких материалов МРТ.</p>		
14	<p>Методика получения и анализа спектра ЯМР $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ для определения структуры и исследования физико-химических свойств широкого круга органических и элементоорганических соединений, в том числе функциональных и гибридных новых материалов различной химической природы, гомогенных и гетерогенных катализаторов, сенсоров, магнитных материалов, нанокompозитов, фармcубcтанций и потенциалных медицинcких и фармпрепаратов, соединений, обладающих биологической активностью, стимуляторов и ингибиторов роста растений, хелаторов радиоактивных изотопов, магнитных медицинcких материалов МРТ.</p>	<p>Методика решает задачу структурного определения общего количества и положений ядер ^{13}C в структуре исследуемого соединения. Результатом выполнения задачи является получение и интерпретация спектра ЯМР $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ с подтверждением или опровержением предполагаемой структуры продукта, определением чистоты и/или изомерного состава.</p>	нет