

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 12.07.2023 14:18:02
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«26» апреля 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность программы магистратуры

Неорганическая химия и химия координационных соединений

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2023

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Заведующий кафедрой Профессор		доцент Изотова С.Г. профессор Чарыков Н.А.

Рабочая программа дисциплины обсуждена на заседании кафедры физической химии
протокол от «18» апреля 2023 № 4
Заведующий кафедрой

С.Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов
протокол от «20» апреля 2023 №7

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		С.Г.Изотова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Труханович
Начальник учебно-методического управления		С.Н.Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Объем дисциплины.....	6
4. Содержание дисциплины.....	7
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	9
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	9
4.3.2. Занятия лабораторного типа.....	10
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	11
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	11
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	11
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	13
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	13
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	13
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	14
10.1. Информационные технологии.....	14
10.2. Программное обеспечение.....	14
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	14
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	14
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	14
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.	

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p>ОПК-1.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения</p>	<p>Знать методы и классификацию физико-химических методов исследования Уметь выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач Владеть навыками работы на современных приборах</p>
<p>ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>ОПК-2.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии</p>	<p>Знать основные физико-химические законы, правила, закономерности Уметь применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений Владеть навыками формулировки и постановки задач и их математического решения</p>
<p>ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для</p>	<p>ОПК-3.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Знать основные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности Уметь пользоваться программными продуктами для решения</p>

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
решения задач профессиональной деятельности		задач профессиональной деятельности Владеть методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных
ОПК-4. Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	ОПК-4.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности	Знать перечень основных журналов и список текущих конференций, соответствующих области профессиональной деятельности Уметь составлять план публикации, писать публикацию и осуществлять ее научно-техническое сопровождение Владеть навыками работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно-технической и патентной информации

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Методы исследования строения и физических свойств веществ» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы магистратуры.

Изучается на первом курсе, в первом семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин бакалавриата «Физические методы анализа», «Физическая химия» и «Физико-химические методы исследования веществ и материалов». Полученные в процессе изучения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Физико-химические процессы образования новой фазы», «Химические и фазовые равновесия в многокомпонентных системах», «Физико-химические процессы в электрохимических преобразователях энергии», «Физико-химические процессы в наноразмерных системах», «Физическая химия поверхностных явлений и наноматериалов», в научно-исследовательской работе, при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	5/ 180
Контактная работа с преподавателем:	96
занятия лекционного типа	32
занятия семинарского типа, в т.ч.	48
семинары, практические занятия	16
лабораторные работы	32
курсовое проектирование (КР или КП)	16
КСР	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	57
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	индивидуальные задания, тесты
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	КР Экзамен/27

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Общая характеристика и классификация физико-химических методов.	2	-	-	5	ОПК-1	ОПК-1.1
2.	Спектроскопические методы. Физико-химические основы	6	6	20	15	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4	ОПК-1.1 ОПК-2.1 ОПК-3.1 ОПК-4.1
3	Резонансные, оптические и другие методы	24	10	12	37	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4	ОПК-1.1 ОПК-2.1 ОПК-3.1 ОПК-4.1

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<p>Общая характеристика и классификация физико-химических методов. Метод и методика химического анализа. Основные определения и понятия в химическом анализе. Химические, физические, и физико-методы анализа. Общая Классификация физико-химических методов анализа.</p>	2	традиционная лекция, лекция-визуализация
2	<p>Спектроскопические методы. Физико-химические основы Спектральные методы анализа. Шкала электромагнитных длин волн. Инфракрасные спектры. Электронные спектры. Атомно-абсорбционная и атомно-эмиссионная спектроскопия. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Закон Ломакина – Шайбе. Методы анализа, основанные на светорассеянии. Упругое и неупругое рассеяние света. Спектры комбинационного рассеяния. Динамическое светорассеяние. Конус Тиндаля, принцип действия ультрамикроскопа. Нефелометрия и турбодиметрия. Рассеяние света на заряженных частицах.</p>	6	традиционная лекция, лекция-визуализация
3	<p>Резонансные, оптические и другие методы Рентгеновские методы анализа. X-лучи. Рентгеновский эмиссионный анализ. Рентгеновский абсорбционный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ. Рентгенофазовый анализ. Рентгеноструктурный анализ. Рентгеновское малоугловое рассеяние. Радиометрические методы физико-химического анализа, виды радиоактивного излучения. Сцинтилляционные методы анализы, счетчики Гейгера (Мюллера), ионизационные камеры. Метод геохронологии. Активность и доза облучения. Закон радиоактивного распада. Понятие поверхностного натяжения. Экспериментальные доказательства наличия поверхностных сил. Методы определения поверхностного натяжения (статические, динамические, квазистатические) – классификация. Метод Дю-Нюи, сталлагмометрический, капиллярного поднятия, максимального давления пузырька, отрыва кольца, стоячих (бегущих) волн.</p>	24	традиционная лекция, лекция-визуализация

	<p>Микроскопические методы анализа. Оптическая, поляризационная, электронная, электронно-силовая, магнитно-силовая, рентгеновская микроскопия,</p> <p>Магнитные методы анализа. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода, из свойства. Магнитная индукция, сила Лоренца, магнитный момент контуров и элементарных частиц. Классы магнитных материалов и их физические свойства, генезис. Температурная зависимость магнитной восприимчивости. Магнитная восприимчивость и методы физико-химического анализа для ее определения. Методы ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса.</p> <p>Термические методы анализа: термовесы, виды калориметрии, комплексный термический анализ, ТГ, ДТГ, ТА, ДТА кривые.</p> <p>Электрохимические методы физико-химического анализа: потенциометрия, вольт-амперометрия, полярография, кондуктометрия, диэлькометрия. Уравнение Нернста, уравнение Таффеля, уравнение концентрационной поляризации.</p> <p>Хроматографические методы физико-химического анализа. Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия. Порометрия, сорбтометрия. Вискозиметрия и тензиметрия</p>		
--	--	--	--

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p>Определение типа координации анионов на поверхности наноструктурированных материалов методом ИК спектроскопии.</p> <p>или</p> <p>Изучение фазовых превращений наноструктурированного материала методом ИК спектроскопии.</p> <p>Анализ научного эксперимента. Идентификация ИК спектра твердофазного неорганического наноматериала.</p> <p>Расчет концентраций компонентов в четырехкомпонентной системе, по электронному спектру, используя данные по коэффициентам экстинкции индивидуальных веществ на трех длинах волн.</p> <p>Определение времени жизни муффицированных остатков животного по</p>	6	групповая дискуссия, компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности.

	<p>результатам изотопного анализа $^{12}\text{C}/^{14}\text{C}$</p> <p>Определение массы тела, взвешенного относительно сил поверхностного натяжения.</p> <p>Определение числа, типов и фактора вырождения нормальных колебаний молекул воздуха в промышленной зоне. Определение активности данных молекул в ЯМР и ЭПР спектроскопии.</p> <p>Расшифровка масс-спектра смеси фуллереновых нанокластеров. Полуколичественная оценка концентраций различных нанокластеров.</p>		
3	<p>Определение модельных параметров изотермы адсорбции: Генри, Лэнгмюра, Фрейлиха, БЭТ. Расчет адсорбции по модельным уравнениям.</p> <p>Определение числа мономерных форм и ассоциатов n-го порядка в ассоциатах (n+1)-го порядка при иерархической ассоциации в растворах.</p> <p>Расчет удельной поверхности углеродных нанокластеров различного типа на основе гексагонов, пентагонов и тетрагонов известной геометрии</p> <p>Расчет зависимости физико-химических свойств микро- и нанофазовых образований от линейных размеров.</p> <p>Расчет фрактальной размерности в системах различного типа организаций</p> <p>Выбор и обоснование конкретного метода ФХМА для анализа природных и техногенных объектов опробирования.</p> <p>Деловая игра – научный семинар на тему «Современные методы исследования строения и физических свойств веществ»</p> <p>Защита курсовых работ.</p>	10	занятие – конференция, круглый стол, компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности

4.3.2. Занятия лабораторного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
2	<p>Получение и идентификация инфракрасных спектров органических и неорганических материалов. Определение характера координации функциональных групп на поверхности оксидных материалов</p> <p>Квантово-химический расчет колебательных и электронных и спектров органических и неорганических материалов</p>	20	
3	Определение концентрации легких фуллеренов	12	Работа в малых

	С60 и С70 в фуллереновой саже методов электронной спектрофотометрии. Определение динамической и кинематической вязкости жидких растворов Проведения рентгенофазового анализа образца сорбента, пигмента или гетерогенного катализатора		группах
--	--	--	---------

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Выбор темы сообщения-презентации на научном семинаре. Поиск и анализ литературных данных по теме сообщения-презентации. Подготовка к тестированию. Подготовка слайд-презентации доклада к научному семинару «Современные методы исследования строения и свойств молекул». Выполнение индивидуального задания «Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения»	31	Проверка слайд-презентации, выступление на научном семинаре. Защита индивидуального задания
3	Методы термодинамического моделирования фазовых равновесий, открытых и закрытых фазовых процессов Дифференциальное обобщенное уравнение Ван-дер-Ваальса	27	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: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена и курсовой работы.

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене:

Вариант №...

1. Магнитная восприимчивость и методы физико-химического анализа для ее определения.
2. Спектры комбинационного рассеяния.
3. Задача. На дне океана залегает нефтяное месторождение. Какими методами физико-химического анализа можно качественно идентифицировать его наличие, не пробуривая пробные скважины?

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «удовлетворительно».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Ч. 1: Общие вопросы спектроскопии / М. А. Ельяшевич. – 5-е изд., стер. – М.: Кн.дом «Либроком», 2011. – 236 с.
2. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия Ч. 2: Атомная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. – 5-е изд., – М.: Кн.дом «Либроком», 2009. – 415 с.
3. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия Ч. 3: Молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - 5-е изд., – М.: Кн.дом «Либроком», 2009. – 527 с.
4. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 384с.
5. Практикум по физической химии. Физические методы исследования: учебное пособие для вузов по направлению "Химия" и спец. "Химия" / [Е. П. Агеев и др.] ; Под ред. М. Я. Мельникова [и др.]. - М.: Академия, 2014. - 528 с. - (Высшее профессиональное образование). - Библиогр. в конце разд. - ISBN 978-5-7695-9551-6
6. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: Учебник для химических спец. вузов / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - М. : ICSPF PRESS, 2011. - 694 с. : ил. - Библиогр.: с. 680. - ISBN 978-5-903078-34-9
7. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений/ Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл.-М.:Бином.Лаборатория знаний.- 2012.- 557 с.

б) электронные учебные издания:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – Бином. Лаборатория знаний, 2017 – 522 с. (ЭБС «Лань»)
2. Изотова, С.Г. Определение типа координации анионов на поверхности наноструктурированных материалов методом ИК спектроскопии: Методические указания к лабораторной работе/ С.Г. Изотова, С.Ильхан, А.А.Комлев, Е.Б.Юдина, А.К.Василевская. – СПб.: СПбГТИ(ТУ). 2014.-57 с. ЭБ
3. Павлова, Е.А. Определение размера наночастиц по области когерентного рассеяния методом рентгеновской дифракции: Методические указания к лабораторной работе/ Е.А. Павлова, С.Г. Изотова. – СПб.: СПбГТИ(ТУ). 2013.-31 с. ЭБ

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Учебный план, РПД, учебно-методические материалы, размещенные на <http://media.technolog.edu.ru>.

Электронно-библиотечные системы:

ЭБС «Лань»: <https://e.lanbook.com/books/>;

электронный читальный зал – БиблиоТех фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru/ЭБС.>, <https://technolog.bibliotech.ru/>.

справочно-информационный портал «Научная электронная библиотека»: <http://elibrary.ru>.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические 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 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

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

На занятия студент должен приходиться, имея знания 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 ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Windows XP Starter Edition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно),

Microsoft Office (Microsoft Excel): Office 2007 Russian OLP NL AE (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), Office Std 2013 Rus OLP NL (Контракт № 02(03)15 от 15.01.2015, срок действия -20 лет),

- LibreOffice (открытая лицензия),
- программный комплекс Gaussian 9.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Для проведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники с лицензионным программным обеспечением и выходом в интернет и на сервер образовательной организации, на 33 посадочных места.

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.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
«Методы исследования строения и физических свойств веществ»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ОПК-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	промежуточный
ОПК-2	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	промежуточный
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	промежуточный
ОПК-4	Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	промежуточный

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ОПК-1.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения	Знает методы и классификацию физико-химических методов исследования	Ответы на вопросы к экзамену №1-22	Классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ с ошибками	Классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ
	Умеет выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач	Ответы на вопросы к экзамену №1-22	Выбирает методы расчета химического и фазового состава с ошибками	Выбирает методы расчета химического и фазового состава с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно выбирает методы расчета химического и фазового состава
	Владет навыками работы на современных приборах	Ответы на вопросы к экзамену №1-22	Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах с ошибками	Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах с помощью	Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах и анализирует

				преподавателя	полученные результаты
ОПК-2.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии	Знает основные физико-химические законы, правила, закономерности	Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания	Перечисляет основные расчетные физико-химические формулы, правила, закономерности с ошибками	Перечисляет основные расчетные формулы, правила, закономерности с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно перечисляет основные физико-химические расчетные формулы, правила, закономерности
	Умеет применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений	Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания	Поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям с ошибками	Поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям
	Владеет навыками формулировки и постановки задач и их математического решения	Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания	Демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов с ошибками	Демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов, анализирует полученные результаты

ОПК-3.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности	Знает основные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания	Перечисляет особенности работы с программными пакетами с ошибками	Перечисляет особенности работы с программными пакетами с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно перечисляет особенности работы с программными пакетами
	Умеет пользоваться программными продуктами для решения задач профессиональной деятельности	Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания	Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества с ошибками	Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества

	Владеет методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных	Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания	Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных с ошибками	Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных и анализирует полученные результаты
ОПК-4.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности	Знает перечень основных журналов и список текущих конференций, соответствующих области профессиональной деятельности	Ответы на вопросы к экзамену №36-41	Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, с ошибками	Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, использует их в научной работе, анализирует полученную информацию
	Умеет составлять план публикации, писать публикацию и осуществлять ее научно-техническое сопровождение	Ответы на вопросы к экзамену №36-41	Показывает навыки составления плана публикации с ошибками	Показывает навыки составления плана публикации с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно составляет план публикации и готовит ее
	Владеет навыками работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно-технической и патентной информации	Ответы на вопросы к экзамену №36-41	Демонстрирует навыки работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно-	Демонстрирует навыки поиска научно-технической и патентной информации по	Правильно находит научно-техническую и патентную информацию по структуре молекул и их свойствам и

			технической и патентной информации с ошибками	структуре молекул и их свойствам с помощью преподавателя	анализирует ее
--	--	--	---	--	----------------

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена, шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации (экзамена)

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-1 (ОПК-1.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения):

1. Классификация физико-химических методов анализа.
2. Инфракрасные спектры.
3. Спектры комбинационного рассеяния.
4. Электронные спектры.
5. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
6. Рентгеновские, X-лучи.
7. Рентгеновский эмиссионный анализ.
8. Рентгеновский абсорбционный анализ.
9. Рентгено-флуоресцентный анализ.
10. Рентгенофазовый анализ.
11. Рентгеноструктурный анализ.
12. Методы определения поверхностного натяжения (статические, динамические, квазистатические) – классификация.
13. Метод Дю-Нюи, сталлагмометрический, капиллярного поднятия, максимального давления пузырька, отрыва кольца, стоячих (бегущих) волн.
14. Микроскопические методы физико-химического анализа.
15. Оптическая, электронная, рентгеновская микроскопия.
16. Магнитная индукция, сила Лоренца, магнитный момент контуров и элементарных частиц.
17. Магнитная восприимчивость и методы физико-химического анализа для ее определения.
18. Методы ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса.
19. Хроматографические методы физико-химического анализа.
20. Электрохимические методы физико-химического анализа: потенциометрия, вольт-амперометрия, полярография, кондуктометрия, диэлькометрия.
21. Радиометрические методы физико-химического анализа, виды излучения.
22. Сцинтилляционные методы анализы, счетчики Гейгера (Мюллера), ионизационные камеры.

б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-2 (ОПК-2.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии):

23. Шкала электромагнитных длин волн.
24. Энергия фотона, длина волны, частота, волновое число.
25. Пропускание, оптическая плотность.
26. Рентгеновское малоугловое рассеяние.
27. Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия.
28. Термические методы анализа: термовесы, виды калориметрии, комплексный термический анализ, ТГ, ДТГ, ТА, ДТА кривые.
29. Метод геохронологии.

в) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-3 (ОПК-3.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности):

30. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
31. Закон Бугера-Ламберта-Бера.
32. Конус Тиндаля, принцип действия ультрамикроскопа.
33. Нефелометрия, турбодиметрия.
34. Вискозиметрия и тензиметрия.
35. Уравнение Нернста, уравнение Таффеля.

г) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-4 (ОПК-4.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности):

36. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода, из свойства.
37. Понятие поверхностного натяжения.
38. Экспериментальные доказательства наличия поверхностных сил.
39. Порометрия, сорбтометрия.
40. Классификация методов физико-химического анализа, основанных на рассеянии света.
41. Классы магнитных материалов их физические свойства, генезис. Температурная зависимость магнитной восприимчивости.

При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше, и задачу.

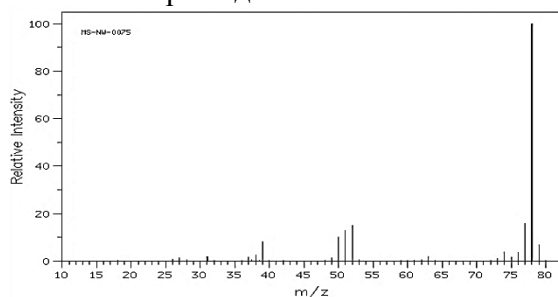
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

4. Пример индивидуального задания

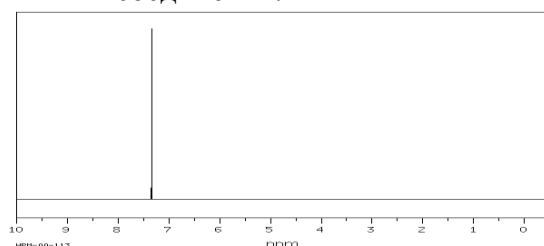
Индивидуальное задание - Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения

Для соединения с брутто-формулой C_6H_6 получены экспериментальные данные: масс-спектр, спектр протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасный спектр поглощения.

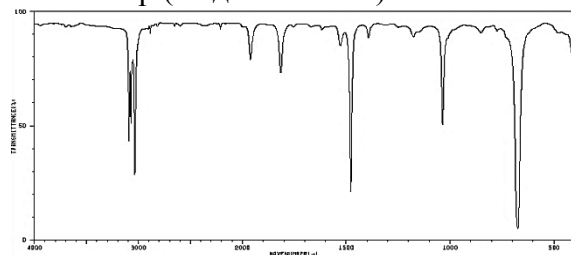
Масс-спектр соединения:



1H ЯМР соединения:



ИК спектр (жидкая пленка):



1. Определить молекулярную массу соединения.
2. Провести анализ спектров. Результаты представить в виде таблиц.

Таблица 1 – Отнесение линий масс-спектра соединения

m/z	Интенсивность, %	Отнесение линий
78	100	M^+
...		

Таблица 2 – Отнесение линий спектра 1H ЯМР соединения

Химический сдвиг, ppm	Интенсивность, %	Отнесение линий
7,4	100	H_a

Таблица 3 – Отнесение полос в ИК спектре соединения

Волновое число, cm^{-1}	Пропускание, %	Отнесение полос
3091	42	
3072	49	
3056	27	
1961	77	
1815	70	
1526	81	
1479	20	
1393	84	
1176	86	
1038	49	
674	4	

3. Сделать вывод о структуре соединения.

5. Примерные темы курсовых работ

1. Метод динамического светорассеяния
2. Метод рентгеновского малоуглового рассеяния
3. Нефелометрия и турбодиметрия
4. Атомно-абсорбционная спектроскопия
5. Комбинационное рассеяние света, Рамановская спектроскопия
6. Метод ядерного магнитного резонанса
7. Метод электронного парамагнитного резонанса
8. Полярография и амперометрия
9. Метод геохронологии
10. Метод сканирующей калориметрии
11. Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия
12. Жидкостная и газовая хроматография
13. Методы определения поверхностного натяжения

6. Примерные темы сообщений на научном семинаре:

К научному семинару «Современные спектральные методы исследования»:

1. Спектры флуоресценции, фосфоресценции.
2. Оже-спектроскопия.
3. Спектроскопия отражения.
4. Совместное использование колебательно-вращательных ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния для суждения о структуре и свойствах молекул.
5. Идентификация неорганических веществ по ИК- и КР-спектрам.
6. Идентификация органических веществ по ИК- и КР-спектрам.

К научному семинару «Современные методы исследования строения и физических свойств молекул»:

1. Мессбауэровская спектроскопия.
2. Резонансные методы.
3. Рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия.
4. Микроскопические и зондовые методы.
5. Масс-спектрометрия.
6. SQUID магнитометрия.
7. Эллипсометрия.
8. Обратное резерфордское рассеяние.
9. Хроматография.

К научному семинару «Современные методы исследования и диагностики наноструктур»:

1. Определение структуры молекулы по спектрам ЯМР.
2. ЯМР и ЯКР спектроскопия твердого тела.
3. Применение методов ЯМР в исследованиях наночастиц.
4. Структура спектров ЭПР; изучение кинетики и механизмов гетерогенных реакций с участием наночастиц методом ЭПР
5. Применение ЭПР для исследования структуры и динамики наноразмерных систем.
6. Изучение структуры молекул и кристаллов методом ЯКР
7. Применение ИК спектроскопии для исследования адсорбатов и наноструктурированных систем.
8. Применение КР спектроскопии к исследованиям наноструктур и наноматериалов.
9. Изомерный (химический) сдвиг в спектрах Мессбауэра, применение спектров в химии наноразмерных систем
10. Рентгеновские методы исследования структуры твердофазных материалов
11. Спектральные методы исследования структуры.
12. Зондовые методы (сканирующая туннельная, атомно-силовая и сканирующая электронная микроскопия).
13. Зондовые методы за пределами топографии.
14. Просвечивающая и растровая электронная микроскопия.
15. Электронная микроскопия высокого разрешения (HREM).
16. Зондовый рентгено-флуоресцентный микроанализ.

7. Вопросы для подготовки к коллоквиуму

К коллоквиуму по лабораторно-практической работе «Определение типа координации анионов на поверхности наноструктурированных материалов методом ИК спектроскопии» (или «Изучение фазовых превращений наноструктурированного материала методом ИК спектроскопии») и «Анализ научного эксперимента. Идентификация ИК спектра твердофазного неорганического наноматериала»:

1. Метод ИК спектроскопии.
2. Механизм возникновения колебательно-вращательной спектров.
3. Правила отбора в колебательно-вращательных спектрах.
4. Нормальные колебания.
5. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул.
6. Типы симметрии нормальных колебаний.
7. 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.
8. Характеристичность нормальных колебаний. Концепция групповых частот и её ограничения.
9. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекул.
10. Идентификация спектральных данных.
11. Качественный и количественный анализ по ИК и КР спектрам.
12. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций.
13. Активность нормальных колебаний в ИК и КР спектрах.
14. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₂.
15. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₃.
16. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₄.
17. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₂ в координированном состоянии.
18. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₃ в координированном состоянии.
19. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY₄ в координированном состоянии.
20. Спектральные проявления координации CO₃²⁻-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
21. Спектральные проявления координации HCO₃⁻-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
22. Спектральные проявления координации SO₄²⁻-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
23. Спектральные проявления координации RCOO⁻-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
24. Устройство инфракрасного Фурье-спектрометра.
25. Принцип работы инфракрасного Фурье-спектрометра.
26. Закон Бугера-Ламберта-Бера.
27. Особенности приготовления твердофазных образцов для измерения ИК спектров.
28. Идентификация спектральных данных неорганических и органических веществ.
29. Качественный и количественный анализ по ИК- и КР- спектрам.
30. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций.
31. Методы НПВО и МНПВО. Применение ИК-спектроскопии для исследования адсорбатов и наноструктурированных систем.

32. Применение КР-спектроскопии к исследованиям наноструктур и наноматериалов.

8. Вопросы для подготовки к тестированию

1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов исследования и диагностики материалов.
2. Прямая и обратная задачи физико-химических методов.
3. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода.
4. Вращательные спектры линейных молекул и молекул типа симметричного и асимметричного волчков.
5. Определение геометрических характеристик полярных молекул методом вращательной спектроскопии.
6. Механизм получения вращательных спектров комбинационного рассеяния.
7. Определение геометрических характеристик неполярных молекул методом КР.
8. Достоинства, недостатки и возможности метода колебательной спектроскопии.
9. Основные, обертоновые и составные частоты.
10. Правила отбора и интенсивность полос колебательных переходов в ИК и КР спектрах.
11. Частоты и формы нормальных колебаний молекул.
12. Естественные и нормальные координаты молекул.
13. Коэффициенты кинематического взаимодействия и силовые постоянные.
14. Типы симметрии нормальных колебаний.
15. Характеристичность нормальных колебаний. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекул.
16. Практическое использование ИК и КР спектров. Идентификация спектральных данных. Качественный и количественный анализ по ИК и КР спектрам. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций.
17. Методы НПВО и МНПВО.
18. Колебательно-вращательная структура электронных состояний и электронно-колебательно-вращательные переходы в молекулах. Тонкая и сверхтонкая структура электронных спектров молекул. Принцип Франка-Кондона.
19. Классификация и номенклатура электронных состояний и переходов между ними в двухатомных, многоатомных линейных и нелинейных молекулах.
20. Классификация по Каца и Малликену. Хромофорные и ауксохромные группы, переходы с переносом заряда.
21. Применение электронных спектров поглощения в качественном, количественном и структурном видах анализа. Определение молекулярных постоянных двухатомных молекул.
22. Спектры флуоресценции и фосфоресценции.
23. Метод фотоэлектронной спектроскопии.
24. Метод Оже-спектроскопии
25. Основы дифракции рентгеновских лучей. Обратная решетка.
26. Основные формулы рентгеноструктурного анализа.
27. Рентгенофазовый анализ.
28. Определение параметров элементарных ячеек
29. Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным. Метод Ритфельда.
30. Метод ЯМР
31. Метод ЭПР.
32. Метод ЯКР
33. Метод ядерного гамма-резонанса
34. Метод масс-спектрометрии. Типы ионов в масс-спектрометрии. Методы ионизации

молекул.

35. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах.
36. Методы изучения поляризуемости молекул
37. Микроскопические и зондовые методы

8. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена и курсовой работы.

Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).