

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 13.03.2024 13:35:02
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
«_____» _____ 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА**

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация

Химия материалов

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2023

Б1.О.18

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины.....	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины...	06
4.3. Занятия лекционного типа.....	07
4.4. Занятия семинарского типа.....	09
4.4.1. Семинары, практические занятия	09
4.4.2. Лабораторные занятия.....	11
4.5. Самостоятельная работа обучающихся	13
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	14
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	14
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	15
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	15
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	16
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	16
10.1. Информационные технологии.....	16
10.2. Программное обеспечение.....	17
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	17
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы	17
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	17
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	18

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.1 Выбор физического метода анализа, методики анализа вещества или материала и приборного обеспечения	Знать: основные физические и химические законы, лежащие в основе базовых физических методов анализа (ЗН-1); методы и классификацию физико-химических методов анализа веществ (ЗН-2) Уметь: производить обработку экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа, и их представление для публикации (У-1); выбирать корректный метод и методику для решения ФМА (У-2) Владеть: навыками оценки точности, достоверности, чувствительности, воспроизводимости экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа (Н-1), базовыми навыками работы на современных приборах, используемых для физических методов анализа (Н-2)

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части (Б1.О.18), и изучается на 2 курсе в 4 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Неорганическая химия», «Математика», «Физика».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Физические методы анализа» знания, умения и навыки могут быть использованы 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)	4/ 144
Контактная работа с преподавателем:	116
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	90
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	54
курсовое проектирование (КР или КП)	8
КСР	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	28
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	КР, Зачёт

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	Лабораторные работы			
1	Методы определения геометрии молекул и веществ. Метод вращательной спектроскопии	3	6	6	4	ОПК-3	ОПК-3.1
2	Колебательная спектроскопия.	3	6	6	4	ОПК-3	ОПК-3.1
3	Методы электронной спектроскопии. Спектроскопия в видимой и УФ областях.	3	6	6	4	ОПК-3	ОПК-3.1
4	Спектроскопия ЯМР ¹ H, ¹³ C. Двумерные техники спектроскопии ЯМР и их практическое применение.	3	6	16	6	ОПК-3	ОПК-3.1
5	Термические методы анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), термогравиметрия, дериватография.	3	6	8	4	ОПК-3	ОПК-3.1
6	Реология и реометрия.	3	6	12	6	ОПК-3	ОПК-3.1

4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ОПК-3.1	Методы определения геометрии молекул и веществ. Метод вращательной спектроскопии. Колебательная спектроскопия. Методы электронной спектроскопии. Спектроскопия в видимой и УФ областях. Спектроскопия ЯМР ¹ H, ¹³ C. Двумерные техники спектроскопии ЯМР и их практическое применение. Термические методы анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), термогравиметрия, дериватография. Реология и реометрия.

4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Методы определения геометрии молекул и веществ. Метод вращательной спектроскопии.</u> Схема радиоспектрометра. Условия получения микроволнового спектра полярных молекул. Область частот. Матричный элемент дипольного момента перехода для полярных молекул. Типы спектров. Правила отбора. Использование Фурье-спектрометров для исследования ван-дер-ваальсовых молекул и малостабильных молекул.	3	ЛВ, РД
2	<u>Колебательная спектроскопия</u> Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные координаты. Коэффициенты кинематического взаимодействия. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы. Симметрия нормальных колебаний, координаты симметрии. Анализ нормальных колебаний молекулы по экспериментальным данным. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекулы. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Определение силовых полей молекулы и проблема их неоднозначности. Использование изотопических разновидностей молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул.	3	ЛВ, РД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
3	<p><u>Методы электронной спектроскопии. Спектроскопия в видимой и УФ областях.</u></p> <p>Эмиссионная УФ спектроскопия как метод исследования двухатомных молекул. 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.</p>	3	ЛВ, РД
4	<p><u>Спектроскопия ЯМР ¹H, ¹³C. Двумерные техники спектроскопии ЯМР и их практическое применение.</u></p> <p>Теоретические основы спектроскопии ЯМР. Возможности идентификации и оценки качества исходных веществ, промежуточных и целевых продуктов химических процессов. Спектры гомо- и гетероядерной корреляции. Возможности кинетических исследований, мониторинга протекания химических реакций.</p>	3	ЛВ, РД
5	<p><u>Термические методы анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), термогравиметрия, дериватография.</u></p> <p>Дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК). Теоретические основы и практическая реализация. Особенности пробоподготовки. Проведение анализа и интерпретация результатов. Теплота фазовых переходов, температура стеклования. Применение в химических технологиях.</p> <p>Термогравиметрия. Теоретические основы и практическая реализация. Определение важнейших технологических характеристик веществ и материалов. Контроль качества и возможности идентификации.</p>	3	ЛВ, РД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	<p><u>Реология и реометрия.</u> Агрегативная устойчивость и взаимодействие частиц, молекулярная и электростатическая составляющие. Переход Дерягина, потенциальные кривые. Основы теории ДЛФО. Фрактальная модель коагуляционного структурирования в дисперсных системах. Основы реологии. Особенности реологии дисперсных систем, паст, гелей. Тиксотропия и дилатансия как технологические характеристики веществ и материалов. Оборудование для реологических исследований. Осцилляционная реометрия. Реологические характеристики материалов. Использование реометрии для мониторинга процессов отверждения и гелеобразования.</p>	3	ЛВ, РД

4.4. Занятия семинарского типа.

4.4.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<p><u>Методы определения геометрии молекул и веществ. Метод вращательной спектроскопии.</u> Возможности обнаружения молекул в межзвездной среде. Определение дипольного момента молекул из микроволновых спектров. Определение геометрических параметров молекул из микроволновых спектров. Метод изотопного замещения.</p>	6	АТД

№ раздела дисциплин ы	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационна я форма
2	<p><u>Колебательная спектроскопия.</u> Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Исследования динамической изомерии, равновесий, кинетики реакций. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, прозрачные материалы, приготовление образцов. Аппаратура спектроскопии КР, преимущества лазерных источников возбуждения.</p>	6	МШ
4	<p><u>Методы электронной спектроскопии.</u> <u>Спектроскопия в видимой и УФ областях.</u> О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях. 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.</p>	6	МШ
4	<p><u>Спектроскопия ЯМР ¹H, ¹³C. Двумерные техники спектроскопии ЯМР и их практическое применение.</u> Качественный и количественный анализ ЯМР спектров веществ и их смесей. Определение констант спин-спинового взаимодействия. Правила представления результатов анализа спектров ЯМР. Расшифровка спектров COSY, NOESY, HMBC, HMQC. Специальные возможности спектроскопии ЯМР. Расчет выхода целевого компонента, скорости реакции, молекулярной массы полимера по концевым группам.</p>	6	-

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	Термические методы анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), термогравиметрия, дериватография. Калибровка прибора DSC. Корректировка базовой линии. Расчет фазовых переходов: стеклования, плавления, кристаллизации. Влияние скорости нагрева и массы образца на результаты анализа веществ и материалов. Контроль качества и возможности идентификации. Расчет термостойкости, термостабильности, влажности материала. Расчет степени наполнения органо-неорганических композитов.	6	-
6	Реология и реометрия. Реологические модели. Расчет реологических параметров материала. Расчет фрактальной размерности флокул дисперсных систем.	6	-

4.4.2. Лабораторные работы

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы всего	Примечание
1	<u>Методы определения геометрии молекул и веществ. Метод вращательной спектроскопии.</u> Изучение вращательных спектров с помощью моделирующих программ. Определение вращательных постоянных и межатомных расстояний двухатомных молекул по ИК-Фурье спектрам. Идентификация веществ по вращательным спектрам. Анализ молекул, содержащих изотопные атомы (^{13}C и ^{37}Cl). Определение геометрических параметров молекул: длин и углов связей. Расчет электрических дипольных моментов молекул методом Штарка.	6	-

№ раздела дисциплин ы	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы всего	Примечание
2	<u>Колебательная спектроскопия.</u> Идентификация соединений по ИК-Фурье спектрам. Приобретение навыков работы с программами представления и обработки ИК спектров.	6	-
3	<u>Методы электронной спектроскопии.</u> <u>Спектроскопия в видимой и УФ областях.</u> Регистрация спектров поглощения. Применение УФ спектроскопии для идентификации соединений. Приобретение навыков работы с программами представления и обработки УФ спектров.	6	-
4	<u>Спектроскопия ЯМР ¹H, ¹³C. Двумерные техники спектроскопии ЯМР и их практическое применение.</u> Работа с программами обработки и анализа ЯМР спектров ACDLabsи TopSpin. Получение ЯМР спектра исследуемого образца и его качественный и количественный анализ.	16	МГ
5	<u>Термические методы анализа: дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК), термогравиметрия, дериватография.</u> Проведение ДСК анализа образца по заданию с использованием прибора ShimadzuDSC 60. Проведение дериватографии образца по заданию с использованием прибора ShimadzuTG/DTA 60.	8	МГ
6	<u>Реология и реометрия.</u> Изучение характера течения образца по заданию с использованием прибора AntonPaarMCR 302. Определение реологических технологических характеристик материала с использованием прибора AntonPaarMCR 302. Проведение осцилляционного эксперимента на приборе AntonPaarMCR 302 с целью определения баланса упругих и пластических свойств материала. Проведение теста на тиксотропность на приборе AntonPaarMCR 302.	12	МГ

4.5. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Методы определения геометрии молекул и веществ Метод вращательной спектроскопии. Ознакомление с примерами вращательных спектров.	4	Устный опрос
2	Колебательная спектроскопия. Ознакомление с примерами ИК-спектров. Области применения ИК-спектроскопии.	4	Устный опрос
3	Методы электронной спектроскопии. Спектроскопия в видимой и УФ областях. Количественное применение УФ спектроскопии.	4	Устный опрос
4	Спектроскопия ЯМР. 1. Моделирование спектров ЯМР ^1H , ^{13}C , COSY, HMQC согласно индивидуальному заданию. 2. Определение спиновой системы, ее анализ, вычисление констант спин-спинового взаимодействия. 3. Закономерности расположения в спектре сигналов атомов ^1H и ^{13}C . 4. Определение структуры соединения по брутто-формуле и спектру ЯМР ^1H . 5. Определение геометрической конфигурации сложных молекул с использованием спектров гомоядерной корреляции NOESY. 6. Составление таблиц кросс-пиков двумерных спектров ЯМР. 7. Определение строения сложных молекул на основании анализа спектров ЯМР ^1H , ^{13}C , COSY, HMQC и HMBC.	6	Устный опрос, проверка индивидуально го задания, дискуссия
5	Термические методы анализа. 1. Температура стеклования полимера как характеристика сегментальной подвижности макроцепей. Зависимость температуры стеклования от химического строения макромолекул. Понятие о статистическом сегменте Куна. 2. Определение теплоемкости методом ДСК. 3. Кинетические исследования методом ДСК. 4. Теплостойкость, термостойкость и термостабильность.	4	Устный опрос
6	Реология и реометрия. 1. Виды неньютоновского течения. 2. Ньютоновское, тиксотропное и дилатантное поведения дисперсных систем при течении. 3. Формула Ньютона и Бринкмена для вязкости. 4. Типы структур покоя.	6	Устный опрос, проверка индивидуальных заданий

Примерные темы курсовых работ

Темы курсовых работ формулируются в соответствии с примерами:

1. Получение феррита висмута осаждением и микрореакторным синтезом. Исследование продукта физическими методами анализа.
2. Спектроскопия ЯМР ^1H : согласования спектра со структурной формулой соединения, основываясь на положении сигналов в спектре ^1H , и на их мультиплетности.
3. Определение теплоемкости в заданном диапазоне температур по термограммам, полученным методом ДСК.
4. Подготовка для полимеризации мономера по заданию с помощью двухкратной вакуумной перегонки. Получение спектра ЯМР ^1H перегнанного мономера, проведение анализа химических сдвигов сигналов, спиновой системы и идентификации соединения.
5. Получение полимера полимеризацией подготовленного мономера. С помощью метода гель-проникающей хроматографии определение его молекулярно-массовых характеристик (среднечисленной, среднемассовой молекулярных масс и коэффициента полидисперсности).
6. Характеризация методом ДСК термического поведения полученного полимера.

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: <https://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме защиты курсовой работы, зачёта.

Зачёт предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются теоретическими вопросами (заданиями).

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

Пример варианта вопросов на зачёте:

Вариант № 1

1. Принципы термического анализа. Области применения.
2. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

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 – «зачёт».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Бибик, Е.Е. Коллоидные растворы и суспензии. Руководство к действию / Е.Е. Бибик – Санкт-Петербург: ЦОП "Профессия", 2018. – 252с.- ISBN978-5-91884-092-4.
2. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – Москва: Бином. Лаборатория знаний. – 2012. – 557с. .- ISBN 978-5-94774-392-0
3. Кожухар, В.М. Основы научных исследований: Учебное пособие / В.М. Кожухар. Москва: Дашков и К, 2012. - 216 с. .- ISBN 978-5-394-01711-7
4. Бёккер, Ю. Спектроскопия / Ю. Бёккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под редакцией А.А. Пупышева, М.В. Поляковой. – Москва: Техносфера, 2009. – 527с. .- ISBN 978-5-94836-220-5.

б) электронные учебные издания:

1. Макарова, Л.Ф. Основы стандартизации, метрологии, сертификации: учебное пособие для заочной формы обучения направления подготовки «Информатика и вычислительная техника» / Л.Ф. Макарова; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления. – Санкт-Петербург, СПбГТИ(ТУ), 2010. – 155 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 12.01.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.
2. Соснов, Е.А. Основы научных исследований : в 2-х ч.: текст лекций / Е.А. Соснов; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург, СПбГТИ(ТУ), 2014. Ч.1. – 155 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 12.01.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.
3. Соснов, Е.А. Основы научных исследований : в 2-х ч.: текст лекций / Е.А. Соснов; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург, СПбГТИ(ТУ), 2014. Ч.2. – 87 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 12.01.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

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

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.yandex.ru, www.google.ru, www.rambler.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:
<http://media.technolog.edu.ru> Учебный план, РПД и учебно-методические материалы.

Электронно-библиотечные системы:

<https://technolog.bibliotech.ru> «Электронный читальный зал – БиблиоТех»;

<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

www.scopus.com - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> - Издательство IOP (Великобритания);

www.oxfordjournals.org - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;

<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Физические методы анализа» 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.

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

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

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

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.

WindowsXPStarterEdition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), MicrosoftOffice (MicrosoftExcel): Office 2007 RussianOLPNLAE (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).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

База данных журналов РИНЦ.

1. <http://prometeus.nse.ru> – база ГПНТБ СО РАН.
2. <http://borovic.ru>- база патентов России.
3. <http://1.fips.ru/wps/portal/Register> - Федеральный институт промышленной собственности
4. <http://google.com/patent>- база патентов США.
5. <http://freepatentsonline.com>- база патентов США.
6. <http://patentmatie.com/welcome> - база патентов США.
7. http://patika.ru/Epasenet_patentnie_poisk.html - европейская база патентов.
8. <http://gost-load.ru>- база ГОСТов.
9. <http://worlddofaut.ru/index.php> - база ГОСТов.
10. <http://elibrary.ru> – Российская поисковая система научных публикаций.
11. <http://springer.com> – англоязычная поисковая система научных публикаций.
12. <http://dissforall.com> – база диссертаций.
13. <http://diss.rsl.ru> – база диссертаций.
14. <http://webbook.nist.gov/chemistry> - NIST Standard Reference Database.
15. <http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html> - база спектров химических соединений.
16. http://chemanalitica.com/book/novyuy_spravochnik - Новый справочник химика и технолога

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы¹.

Учебная аудитория для проведения лекционных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран, проектор, компьютер.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран; проектор; компьютеры; спектрометр ИК-Фурье Shimadzu IRTracer-100; калориметр сканирующий дифференциальный Shimadzu DSC-60 Plus; дериватограф Shimadzu DTG-60; микроскоп сканирующий зондовый Shimadzu SPM-9700; ЯМР-спектрометр BrukerBioSpin AGAvance III HD 400; реометр AntonPaarMCR 302; спектрофотометр двухлучевой сканирующий Shimadzu UV-1800; трибометр высокотемпературный Anton PaarГНТ.

Помещение для самостоятельной работы.

Основное оборудование: столы; стулья; проектор; экран; компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

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.

¹ В разделе отображается состав помещений, которые представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой по дисциплине, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Физические методы анализа»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание ²	Этап формирования ³
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	начальный

² **Жирным шрифтом** выделяется та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты не выделяются).

³ Этап формирования компетенции выбирается по п. 2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие)

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)
			«зачтено» (пороговый)
ОПК-3.1 Выбор физического метода анализа, методики анализа вещества или материала и приборного обеспечения	Дает определения основным физическим и химическим законам, лежащим в основе базовых физических методов анализа (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-19 к зачёту	Дает определения основным физическим и химическим законам, лежащим в основе базовых физических методов анализа. Может применить эти знания для решения своих научно-исследовательских задач.
	Рассказывает о методах и классификации физико-химических методов анализа веществ (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы №20-102 к зачёту	Уверенно и без ошибок рассказывает о методах и классификации физико-химических методов анализа веществ, сравнивает их и анализирует.
	Производит обработку экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа, и их представление для публикации (У-1)	Защита лабораторных отчетов, защита курсовой работы	Уверенно и без ошибок производит обработку экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа, и их представление для публикации

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено» (пороговый)
	Выбирает корректный метод и методику для решения ФМА (У-2)	Защита лабораторных отчетов, защита курсовой работы	Хорошо разбирается в использовании корректных методов и методик для решения ФМА.
	Демонстрирует навыки оценки точности, достоверности, чувствительности, воспроизводимости экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа (Н-1)	Защита лабораторных отчетов, защита курсовой работы	Без ошибок демонстрирует навыки оценки точности, достоверности, чувствительности, воспроизводимости экспериментальных данных, полученных физическими методами анализа
	Демонстрирует базовые навыки работы на современных приборах, используемых для физических методов анализа (Н-2)	Защита лабораторных отчетов, защита курсовой работы	Демонстрирует уверенные навыки работы на современных приборах, используемых для физических методов анализа

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

1. Ядерный магнетизм и история открытия явления ЯМР в конденсированных средах.
2. Основные достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР.
3. Внешние и внутренние взаимодействия магнитных моментов ядер.
4. Равновесные динамические процессы и их проявление в спектрах ЯМР.
5. Природа химического сдвига ядер ^1H и факторы, определяющие его значение.
6. Спиновое эхо Э.Хана и его свойства.
7. Спектральные и релаксационные характеристики спектров ЯМР и их связь со строением молекул в растворе.
8. Комбинированное использование многомерных и многоквантовых гомо- и гетероядерных корреляционных методов спектроскопии ЯМР для идентификации сигналов и определения структуры молекул в растворе.
9. Основы теории Дерягина-Ландау-Фервея-Овербека (ДЛФО). Потенциальные кривые взаимодействия частиц. Порог коагуляции по теории ДЛФО.
10. Кинетика коагуляции. Быстрая и медленная коагуляция.
11. Закон внутреннего трения Ньютона. Вязкость. Ньютоновские и неньютоновские жидкости.
12. Вязкость разбавленных устойчивых коллоидных растворов. Уравнение Эйнштейна.
13. Структурообразование. Влияние устойчивости системы и концентрации дисперсной фазы на структуру дисперсных систем.
14. Природа растворов высокомолекулярных соединений (ВМС). Особенности строения и теплового движения макромолекул ВМС. Набухание и растворение ВМС, термодинамические основы этих процессов.
15. Внутреннее вращение и гибкость полимерных молекул. Особенности их теплового движения. Конформационная энтропия.
16. Особые физико-механические свойства полимеров. Стеклообразное, высокоэластическое и вязкотекучее состояния полимеров.
17. Природа растворов полимеров, сходство и различия с коллоидными растворами.
18. Особенности растворения полимеров. Набухание полимеров. Термодинамические основы растворения полимеров.
19. Полиэлектролиты, факторы, влияющие на свойства растворов полиэлектролитов. Применение полиэлектролитов.
20. Базы спектральных данных и правила пользования ими.
21. Дополнительная обработка экспериментальных данных ЯМР во временном и спектральном представлениях.
22. Двумерное представление ЯМР-информации.
23. Правила представления данных ЯМР спектроскопии для их опубликования.
24. История становления и развития термогравиметрии. Термодинамические базы данных.
25. Нормирование кривых ГПХ и подготовка данных к опубликованию.
26. Требования научных журналов к представлению результатов экспериментальных методов анализа.
27. Разделение взаимодействий с помощью последовательности спинового эха в двумерном методе J-COSY.
28. Способы установления схемы скалярного связывания магнитных ядер с помощью корреляционных методов спектроскопии ЯМР. Стереоспецифичность скалярных констант на примере Карплюсовской зависимости $3J = f()$.
29. Перенос поляризации в гетероядерных спиновых системах на примере метода INEPT.

30. Явление кросс-релаксации и использование ядерного эффекта Оверхаузера в структурном и конформационном анализе молекул в растворе.
31. Химическая и магнитная эквивалентность магнитных ядер. Эффекты сильносвязанности в спектрах ЯМР на примере систем АВ и АВХ.
32. Абсолютные и относительные интенсивности сигналов в спектрах ЯМР ¹H и их использование доказательства структуры молекул. Особенности использования интегральных интенсивностей в спектроскопии ЯМР ¹³C.
33. Происхождение кросс-пиков в спектрах COSY и их мультиплетная структура. Определение —активных и —пассивных скалярных констант.
34. Изучение медленных и быстрых (в шкале времени ЯМР) динамических процессов с помощью переноса намагниченности и релаксационных измерений. Спектроскопия EXSY-NOESY.
35. Принципы термического анализа. Области применения.
36. Классификация методов термического анализа по определяемому свойству.
37. Особенности конструкции термовесов.
38. Применение термогравиметрии для качественного и количественного анализа.
39. Методики определения количества процессов, их начала и конца по данным термогравиметрии.
40. Типы артефактов на кривых термогравиметрии. Причины их возникновения.
41. Дифференциально-термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия.
42. Области применения ДТА и ДСК.
43. Виды дифференциальной сканирующей калориметрии.
44. Термоэлектрические преобразователи - термопары. Виды термопар.
45. Эффект Зеебека, коэффициент Зеебека. Термо ЭДС.
46. Конструкция измерительной ячейки дифференциального сканирующего калориметра.
47. Уравнение теплообмена между образцом и окружающей средой.
48. Основные характеристики дифференциального сканирующего калориметра.
49. Факторы, влияющие на результаты дифференциальной сканирующей калориметрии.
50. Принципы подбора условий для проведения измерений дифференциальной сканирующей калориметрии.
51. Синхронный термический анализ. Его преимущества.
52. Варианты исполнения приборов синхронного термического анализа.
53. Системы для анализа выделяющихся газов, применяемые в синхронном термическом анализе.
54. Температура максимальной скорости разложения.
55. Общие принципы калибровки прибора синхронного термического анализа.
56. Обработка результатов измерения и расчет основных параметров процессов, связанных с изменением массы образца и тепловыми эффектами.
57. Фазовые, полиморфные и стеклообразные переходы. Их отличия и проявления на экспериментальных кривых синхронного термического анализа.
58. Математическая обработка результатов реакций без использования модели (model-free kinetics).
59. Калибровка температурной шкалы (ДТА, ТМА, ТГ, дериватографы) в режиме нагревания и охлаждения. Калибровка чувствительности датчиков теплового потока ДСК. Математические методы в калибровке.
60. Планирование термоаналитического эксперимента. Постановка задачи. Параметры прибора. Характеристика образца. Температурный интервал и скорость нагревания. Точность результатов эксперимента.
61. Обработка результатов термоаналитического эксперимента. Факторы, влияющие на результаты термоаналитических измерений (скорость нагревания, масса образца,

- форма и размер тигля, атмосфера). «Пустой» эксперимент. Базовая линия. Параметры термоаналитических пиков (начало, конец, максимум). Правило Кирхгофа.
62. Гели, тиксотропия, синерезис.
 63. Реологические кривые дисперсных систем с различной структурой.
 64. Параметры напряженного состояния дисперсных систем: напряжение, деформация, скорость деформации. Закон Гука. Закон внутреннего трения Ньютона. Основные реологические величины, характеризующие поведение материала под нагрузкой.
 65. Течение в цилиндрическом канале (капилляре) ньютоновских и неньютоновских коллоидных растворов.
 66. Вязкость разбавленных, агрегативно устойчивых дисперсных систем. Условия применимости уравнения Эйнштейна.
 67. Структурирование дисперсных систем. Факторы, определяющие их структуру. Гели и студни. Синерезис.
 68. Структура и особенности течения обратимо коагулирующих дисперсных систем. Тиксотропия. Реологические кривые.
 69. Структура и особенности течения высококонцентрированных суспензий. Дилатансия. Реологические кривые.
 70. Описание импульсной регистрации спектров ЯМР с помощью векторной модели
 71. Прямые и косвенные диполь-дипольные взаимодействия между ядерными спинами $1/2$ и их проявление в спектрах ЯМР.
 72. Импульсная последовательность HSQC как пример —инверсной регистрации гетероядерных скалярных взаимодействий.
 73. Диффузионное движение молекул в растворе как источник релаксационных переходов между Зеемановскими уровнями энергии.
 74. Резонансное взаимодействие магнитных ядер с радиочастотным полем В1
 75. Способы увеличения чувствительности в спектроскопии ЯМР.
 76. Алгоритм создания температурной программы для изучения термической стабильности твердого образца.
 77. Обработка результатов термогравиметрии. Физический смысл и применений первой и второй производной ТГ.
 78. Температурная модуляция в дифференциальном термическом анализе. Возможности метода.
 79. Выделение сигналов обратимых и необратимых тепловых процессов из общего ДСК сигнала.
 80. Основы термокинетики. Основные кинетические модели.
 81. Определение энергии активации из модель-независимого анализа.
 82. Общие принципы выбора кинетической модели для расчета кинетических параметров реакции.
 83. Степень превращение и потеря массы. Дегидратация, возгонка, термическое разложение твердых тел. Аррениусовские координаты. Кинетические модели термического разложения.
 84. Уравнение Шведова-Бингама. Предельное напряжение сдвига. Пластическая и эффективная вязкость.
 85. Реологические кривые течения пластичных дисперсных материалов. Уравнение Шведова-Бингама.
 86. Понятие о фрактальных структурах. Уравнение состояния и реологические уравнения фрактальных структур.
 87. Эффективность хроматографической колонки. Число теоретических тарелок. ВЭТТ. Разрешение. Оптимизация разрешения в хроматографической системе.
 88. Селективность в хроматографии. Фактор разделения, или коэффициент селективности.
 89. Теории хроматографии. Изотермы сорбции.
 90. Теория теоретических тарелок.

91. Кинетическая теория в хроматографии. Оптимальная скорость потока.
92. Хроматографические колонки. Насадочные колонки и способы их приготовления. Твердые носители; неподвижные фазы и их свойства; эффективность и селективность колонок.
93. Термические характеристики пищевых продуктов функционального и специализированного назначения.
94. Статистическая обработка экспериментальных данных по термическим свойствам пищевых продуктов функционального и специализированного назначения.
95. Организация контроля качества на основании анализа данных по термическим свойствам пищевых продуктов.
96. Формирования критериев оценки качества продуктов функционального и специализированного назначения, основанных на их термических характеристиках.
97. Реологические свойства пищевых продуктов функционального и специализированного назначения.
98. Статистическая обработка экспериментальных данных по вязкости, предельному сдвиговому напряжению.
99. Анализ технологии производства пищевых продуктов функционального и специализированного назначения по их реологическим характеристикам.
100. Статистический анализ реологических данных, полученных при различных условиях эксперимента.
101. Реологические характеристики пищевых продуктов функционального и специализированного назначения, представляющих собой пасты, гели, суспензии и эмульсии.
102. Статистическая обработка экспериментальных данных по молекулярной массе продуктов функционального и специализированного назначения, имеющих макромолекулярное строение.

При сдаче зачёта студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

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

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, шкала оценивания – «зачтено» (если достигнут «пороговый» уровень освоения всех элементов компетенции), «не зачтено».