

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 01.11.2023 16:48:04  
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\_» \_\_\_марта\_\_\_ 2019 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**  
**ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ**

Направление подготовки

**04.03.01 Химия**

Направленность программы бакалавриата

**Физическая химия и химия материалов**

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2019

## 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 «05» февраля 2019 № 6  
Заведующий кафедрой

С.Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов  
протокол от «21» марта 2019 № 6

Председатель

С.Г.Изотова

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		С.Г.Изотова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
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.....	11
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	11
4.5. Темы индивидуальных заданий.....	15
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	15
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	15
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	16
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	17
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	17
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	17
10.1. Информационные технологии.....	17
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.....	18
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	18

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 бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-1</b> Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</p>	<p><b>ПК-1.В.14.1</b> Способность выбора методики и выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам</p>	<p><b>Знать</b> стандартные методики выполнения базовых операций при проведении исследований на научных приборах <b>Уметь</b> выполнять стандартные операции по стандартным методикам с использованием базового научного оборудования <b>Владеть</b> стандартными методиками работы на современных приборах</p>
<p><b>ПК-2</b> Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований</p>	<p><b>ПК-2.В.14.1</b> Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения</p>	<p><b>Знать</b> методы и классификацию физико-химических методов исследования <b>Уметь</b> выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач <b>Владеть</b> базовыми навыками работы на современных приборах по стандартным методикам</p>
<p><b>ПК-3</b> Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий</p>	<p><b>ПК-3.В.14.1</b> Владение основами физики, физической химии и математического анализа</p>	<p><b>Знать</b> фундаментальные химические, физические и физико-химические понятия <b>Уметь</b> пользоваться фундаментальными химическими,</p>

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
		физическими и физико-химическими понятиями <b>Владеть</b> базовой терминологией химии, физики, физической химии и математического анализа
<b>ПК-4</b> Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	<b>ПК-4.В.14.1</b> Способность использования законов и закономерностей физической химии для анализа экспериментальных данных	<b>Знать</b> основные физико-химические законы, правила, закономерности <b>Уметь</b> применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений <b>Владеть</b> навыками формулировки и постановки задач и их математического решения
<b>ПК-5</b> Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	<b>ПК-5.В.14.1</b> Способность получения и обработки результатов научных экспериментов с использованием современных программных продуктов	<b>Знать</b> основные программные продукты для обработки результатов научных экспериментов <b>Уметь</b> пользоваться программными продукты для обработки результатов научных экспериментов <b>Владеть</b> методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Физико-химические методы исследования веществ и материалов» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы бакалавриата.

Изучается на четвертом курсе, в седьмом семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия», «Коллоидная химия», «Физические методы анализа», «Основы физики твердого тела» и «Основы научных исследований». Полученные в процессе изучения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Основы квантовой химии», «Математические методы в химии и биохимии», «Физико-химические процессы в электрохимических системах», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	<b>5/ 180</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>117</b>
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	72
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	36
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	9
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>36</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	Тесты, индивидуальное задание
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>Экзамен/27</b>

#### 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.	<b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов.</b>	2	2	-	4	ПК-1 ПК-2 ПК-3 ПК-4 ПК-5	ПК-1.В.14.1 ПК-2.В.14.1 ПК-3.В.14.1 ПК-4.В.14.1 ПК-5.В.14.1
2.	<b>Спектроскопические методы. Физико-химические основы</b>	12	18	18	14	ПК-1 ПК-2 ПК-3 ПК-4 ПК-5	ПК-1.В.14.1 ПК-2.В.14.1 ПК-3.В.14.1 ПК-4.В.14.1 ПК-5.В.14.1
3	<b>Резонансные, оптические и другие методы</b>	22	16	18	18	ПК-1 ПК-2 ПК-3 ПК-4 ПК-5	ПК-1.В.14.1 ПК-2.В.14.1 ПК-3.В.14.1 ПК-4.В.14.1 ПК-5.В.14.1

#### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	<p><b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов.</b></p> <p>Прямая и обратная задачи. Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Классификация, общая характеристика, возможности и области применения физико-химических методов исследования.</p>	2	традиционная лекция, лекция-визуализация
2	<p><b>Спектроскопические методы. Физико-химические основы</b></p> <p>Физико-химические основы спектроскопических методов. Нормальные колебания молекул и ионов. Число, типы, классификации, активность в ИК и КР. ИК спектроскопия, практическое использование. Идентификация спектров органических и неорганических веществ. ИК спектры поглощения газообразных двухатомных и трехатомных молекул. Определение межъядерного расстояния, частот нормальных колебаний и термодинамических функций. Определение энергии водородной связи (теплоты ассоциации). ИК спектры поглощения твердофазных материалов. Диагностика наноматериалов по ИК спектрам. Подготовка газофазных, жидкофазных и твердофазных образцов для регистрации ИК спектров. Анализ ИК спектров диффузного отражения (отчет, контрольное задание по интеграции методов) Практическое использование спектроскопических методов в химии наноразмерного состояния. Применение ИК и КР спектроскопии для исследования адсорбатов и наноструктурированных систем. Спектральные проявления координации частиц к поверхности наноструктурированных материалов.</p>	12	традиционная лекция, лекция-визуализация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
3	<p><b>Резонансные, оптические и другие методы</b></p> <p>Определение структуры по банкам структурных данных. Знакомство с программами визуализации молекул и кристаллических структур, статистической обработки данных.</p> <p>Рентгенофазовый анализ. Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индицирование.</p> <p>Мессбауэровская спектроскопия. Оже-спектроскопия. Резонансные методы. Рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия. Микроскопические и зондовые методы. Масс-спектрометрия. SQUID магнитометрия. Эллипсометрия. Обратное резерфордское рассеяние. Хроматография.</p> <p>Другие методы исследования строения и физических свойств наноструктурированных материалов. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах. Методы изучения поляризуемости молекул.</p> <p>Интеграция методов.</p> <p>Практическое применение методов при изучении наноструктурированных материалов</p>	22	традиционная лекция, лекция-визуализация

#### 4.3. Занятия семинарского типа.

##### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	<p><b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов.</b></p> <p>Чувствительность, разрешающая способность и характеристическое время метода. Классификация, общая характеристика, возможности и области применения физико-химических методов исследования.</p>	2	Слайд-презентация, групповая дискуссия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p><b>Спектроскопические методы. Физико-химические основы</b></p> <p>Физико-химические основы спектроскопических методов.</p> <p>Нормальные колебания молекул и ионов. Число, типы, классификации, активность в ИК и КР.</p> <p>Деловая игра – научный семинар на тему «Современные спектральные методы исследования строения и физических свойств веществ»</p>	18	Научный семинар, слайд-презентации, групповая дискуссия
3	<p><b>Резонансные, оптические и другие методы</b></p> <p>Определение структуры по банкам структурных данных. Знакомство с программами визуализации молекул и кристаллических структур, статистической обработки данных.</p> <p>Рентгенофазовый анализ. Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индицирование.</p> <p>Мессбауэровская спектроскопия. Оже-спектроскопия. Резонансные методы. Рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия. Микроскопические и зондовые методы. Масс-спектрометрия. SQUID магнитометрия. Эллипсометрия. Обратное резерфордское рассеяние. Хроматография.</p> <p>Другие методы исследования строения и физических свойств наноструктурированных материалов. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах. Методы изучения поляризуемости молекул.</p> <p>Интеграция методов.</p> <p>Практическое применение методов при изучении наноструктурированных материалов.</p> <p>Деловая игра – научный семинар на тему «Современные методы исследования строения и физических свойств веществ»</p>	16	Слайд-презентация, групповая дискуссия

#### 4.3.2. Занятия лабораторного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p><b>Спектроскопические методы. Физико-химические основы</b></p> <p>Определение межъядерного расстояния CO в молекуле CO<sub>2</sub> по колебательно-вращательному спектру воздуха.</p> <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.</p> <p>Идентификация ИК спектра твердофазного неорганического наноматериала.</p>	18	Метод малых групп
3	<p><b>Резонансные, оптические и другие методы</b></p> <p>Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индицирование.</p>	18	Метод малых групп

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	<p><b>Общая характеристика и классификация физико-химических методов</b></p> <p>Общая характеристика физико-химических методов исследования и диагностики наноструктур. Возможности и области применения физико-химических методов исследования.</p> <p>Выбор темы сообщения-презентации на научном семинаре.</p> <p>Поиск и анализ литературных данных по теме сообщения-презентации.</p> <p>Подготовка к контрольному тестированию.</p>	4	<p>Устный опрос.</p> <p>Анализ результатов тестирования.</p> <p>Обсуждение сообщения на научном семинаре.</p>

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	<p><b>Спектроскопические методы. Физико-химические основы</b></p> <p>Физико-химические основы вращательных, колебательных, колебательно-вращательных, электронно-колебательно-вращательных и КР спектров. Спектроскопия НПВО и МНПВО.</p> <p>ИК спектроскопия, практическое использование. Идентификация спектров органических и неорганических веществ. ИК спектры поглощения газообразных двухатомных и трехатомных молекул. Определение межъядерного расстояния, частот нормальных колебаний и термодинамических функций. Определение энергии водородной связи (теплоты ассоциации).</p> <p>ИК спектры поглощения твердофазных материалов. Диагностика наноматериалов по ИК спектрам.</p> <p>Практическое использование спектроскопических методов в химии наноразмерного состояния. Применение ИК и КР спектроскопии для исследования адсорбатов и наноструктурированных систем. Спектральные проявления координации частиц к поверхности наноструктурированных материалов.</p>	14	<p>Проверка индивидуального контрольного задания по интеграции методов.</p> <p>Проверка отчетов по лабораторным работам.</p> <p>Анализ результатов тестирования.</p> <p>проверка слайд-презентации, выступление на научном семинаре</p>

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
3	<p><b>Резонансные, оптические и другие методы</b> Рентгенодифракционные методы Дифракционные методы. Рентгенография. Электроннография. Нейтронография. Рентгеноструктурный анализ. Рентгенофазовый анализ.</p> <p>Определение кристаллического строения и размера наночастиц методом рентгеновской дифракции. Определение параметров элементарных ячеек. Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным.</p> <p>Подготовка к лабораторному коллоквиуму «Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индицирование».</p> <p>Оформление отчета по лабораторной работе «Рентгенофазовый анализ. Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индицирование».</p> <p>Резонансные, оптические и другие методы Мессбауэровская спектроскопия. Оже-спектроскопия. Резонансные методы. Рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия. Микроскопические и зондовые методы. Масс-спектрометрия. SQUID магнитометрия. Эллипсометрия. Обратное резерфордское рассеяние. Хроматография.</p> <p>Другие методы диагностики наноструктурированных материалов. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах. Методы изучения поляризуемости молекул.</p> <p>Интеграция методов. Практическое применение методов при изучении наноструктурированных материалов.</p> <p>Выполнение индивидуального контрольного задания по интеграции методов.</p> <p>Подготовка сообщения-презентации к научному семинару: «Современные методы исследования строения и физических свойств веществ».</p> <p>Подготовка к контрольному тестированию.</p>	18	<p>Допуск к лабораторной работе.</p> <p>Проверка отчета по лабораторной работе.</p> <p>Проверка презентаций докладов на научном семинаре по современным методам исследования.</p>

#### 4.5. Темы индивидуальных заданий

Тема индивидуального задания: *Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения.*

#### 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.

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 45 мин.

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене:

##### Вариант №...

1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов исследования и диагностики материалов.
2. Характеристичность нормальных колебаний. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекул.
3. *Задача.* Определите межъядерное расстояние в молекуле АВ по разности волновых чисел полос во вращательном спектре поглощения.

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). - ISBN 978-5-7695-9551-6
6. 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.
7. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений/ Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл.-М.:Бином.Лаборатория знаний.- 2012.- 557 с.
8. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии/ Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. - М.: Мир ; М. : АСТ, 2003. - 683 с
9. Физические методы исследования неорганических веществ: Учебное пособие по специальности 020101 "Химия" направления подготовки 020100 "Химия" / Т. Г. Баличева, Л. П. Белорукова, Р. А. Звинчук и др.; под ред. А. Б. Никольского. - М. : Academia, 2006. - 443 с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). - ISBN 5-7695-2261-5
10. Старостин, В.В. Материалы и методы нанотехнологии: Учебное пособие/ В. В. Старостин; ред. Л. Н. Патрикеев. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 431 с. ЭБС-2012
11. Грибов, Л.А. Колебания молекул/ Л. А. Грибов; РАН. Ин-т геохимии и аналит. химии им. В. И. Вернадского. - М.: Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2009. - 542 с.
12. Пупышев, А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ/ А. А. Пупышев. - М.: Техносфера, 2009. - 782 с.
13. Бёккер, Ю. Спектроскопия/ Ю.Бёккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - М.: Техносфера, 2009. - 527 с.
14. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. А.А.Равделя, А.М.Пономаревой. – СПб.: Аз-book, 2009. – 240 с.
15. Исследование наноструктур с применением сканирующей зондовой микроскопии: учебное пособие / К. Л. Васильева, О. М. Ищенко, Е. А. Соснов, А. А. Малыгин ; СПбГТИ(ТУ). Каф. хим. нанотехнологии и материалов электрон. техники. - СПб. : [б. и.], 2010. - 63 с. : ил. - Библиогр.: с. 61.

### 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»)

## **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 УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. 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 приходить, 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 электронной почты.

### **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  
«Физико-химические методы исследования веществ и материалов»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
<b>ПК-1</b>	Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	промежуточный
<b>ПК-2</b>	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	промежуточный
<b>ПК-3</b>	<b>Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий</b>	промежуточный
<b>ПК-4</b>	<b>Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</b>	промежуточный
<b>ПК-5</b>	Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	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)
<b>ПК-1.В.14.1</b> Способность выбора методики и выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	<b>Знает</b> стандартные методики выполнения базовых операций при проведении исследований на научных приборах	Ответы на вопросы к экзамену №1-3, 16, 25-29, выполнение лабораторных работ 1-3	Перечисляет основные формулы рентгеноструктурного анализа с ошибками	Перечисляет основные формулы рентгеноструктурного анализа с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно перечисляет основные формулы рентгеноструктурного анализа
	<b>Умеет</b> выполнять стандартные операции по стандартным методикам с использованием базового научного оборудования	Ответы на вопросы к экзамену №1-3, 16, 25-29, выполнение лабораторных работ 1-3	Поясняет особенности приготовления образцов для измерения ИК-спектров с ошибками	Поясняет особенности приготовления образцов для измерения ИК-спектров с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно выполняет стандартные операции по приготовлению образцов для измерения ИК-спектров
	<b>Владеет</b> стандартными методиками работы на современных приборах	Ответы на вопросы к экзамену №1-3, 16, 25-29, выполнение лабораторных работ 1-3	Демонстрирует навыки получения ИК-спектров и рентгенодифрактограмм с ошибками	Демонстрирует навыки получения ИК-спектров и рентгенодифрактограмм с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Демонстрирует навыки получения ИК-спектров и рентгенодифрактограмм, анализирует полученные результаты

<b>ПК-2.В.14.1</b> Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения	<b>Знает</b> методы и классификацию физико-химических методов исследования	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 6, 8, 16-19, 21-24, 30-37	Перечисляет физико-химические методы исследования с ошибками	Перечисляет физико-химические методы исследования и их особенности с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно перечисляет физико-химические методы исследования, знает чувствительность, разрешающую способность и характеристическое время метода
	<b>Умеет</b> выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 6, 8, 16-19, 21-24, 30-37	Обосновывает выбор метода и /или методики для решения конкретных профессиональных задач с ошибками	Обосновывает выбор метода и /или методики для решения конкретных профессиональных задач с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Корректно выбирает метод и /или методику для решения конкретных профессиональных задач, анализирует возможности выбранного метода
	<b>Владеет</b> базовыми навыками работы на современных приборах по стандартным методикам	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 6, 8, 16-19, 21-24, 30-37	Демонстрирует навыки работы на ИК-Фурье спектрометре с ошибками	Демонстрирует навыки работы на ИК-Фурье спектрометре с помощью преподавателя	Демонстрирует навыки работы на ИК-Фурье спектрометре, снимает ИК-спектры, выполняет отнесение спектров конкретным колебаниям.

<p><b>ПК-3.В.14.1</b> Владение основами физики, физической химии и математического анализа</p>	<p><b>Знает</b> фундаментальные химические, физические и физико-химические понятия</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену №5, 7, 9-15, 20, выполнение индивидуального задания</p>	<p>Поясняет методику определения геометрических характеристик полярных и неполярных молекул с ошибками</p>	<p>Поясняет методику определения геометрических характеристик полярных и неполярных молекул с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя</p>	<p>Правильно поясняет методику определения геометрических характеристик полярных и неполярных молекул</p>
	<p><b>Умеет</b> пользоваться фундаментальными химическими, физическими и физико-химическими понятиями</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену №5, 7, 9-15, 20, выполнение индивидуального задания</p>	<p>Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов с ошибками</p>	<p>Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя</p>	<p>Правильно поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов,</p>
	<p><b>Владеет</b> базовой терминологией химии, физики, физической химии и математического анализа</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену №5, 7, 9-15, 20, выполнение индивидуального задания</p>	<p>Демонстрирует навыки сопоставления ИК и КР спектров, делает выводы о симметрии молекул с ошибками</p>	<p>Демонстрирует навыки сопоставления ИК и КР спектров, делает выводы о симметрии молекул с незначительными ошибками, с помощью преподавателя</p>	<p>Демонстрирует навыки сопоставления ИК и КР спектров, делает выводы о симметрии молекул, анализирует полученные результаты</p>
<p><b>ПК-4.В.14.1</b> Способность использования законов и закономерностей физической химии</p>	<p><b>Знает</b> основные физико-химические законы, правила, закономерности</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену №4, 6, 9-11, 14, 15, 18, 21, результаты устного опроса</p>	<p>Записывает основные физико-химические уравнения и дает определения основных понятий с</p>	<p>Записывает основные физико-химические уравнения и дает определения основных понятий с незначительными</p>	<p>Правильно записывает основные физико-химические уравнения и дает определения основных понятий,</p>

для анализа экспериментальных данных			ошибками	ошибками, с помощью преподавателя	анализирует полученные результаты
	<b>Умеет</b> применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений	Ответы на вопросы к экзамену №4, 6, 9-11, 14, 15, 18, 21, результаты устного опроса	Показывает алгоритм нахождения геометрических и энергетических характеристик молекул по молекулярным спектрам с ошибками	Показывает алгоритм нахождения геометрических и энергетических характеристик молекул по молекулярным спектрам с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Показывает алгоритм нахождения геометрических и энергетических характеристик молекул по молекулярным спектрам, анализирует полученные результаты
	<b>Владеет</b> навыками формулировки и постановки задач и их математического решения	Ответы на вопросы к экзамену №4, 6, 9-11, 14, 15, 18, 21, результаты устного опроса	Рассказывает особенности использования физико-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств с ошибками	Рассказывает особенности использования физико-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно рассказывает особенности использования физико-химических данных для интерпретации молекулярных спектров, определения структуры молекул и их свойств, приводит примеры
<b>ПК-5.В.14.1</b> Способность получения и обработки результатов научных	<b>Знает</b> основные программные продукты для обработки результатов научных экспериментов	Ответы на вопросы к экзамену №28-29, выполнение индивидуального задания,	Перечисляет программные пакеты для обработки рентгенодифракционных данных с ошибками	Перечисляет программные пакеты для обработки рентгенодифракционных данных с незначительными	Правильно перечисляет программные пакеты для обработки рентгенодифракционных данных,

экспериментов с использованием современных программных продуктов		презентация на научных семинарах «Современные спектральные методы исследования», «Современные методы исследования строения и физических свойств молекул»		ошибками, с помощью преподавателя	интерпретирует полученные результаты
	<b>Умеет</b> пользоваться программными продуктами для обработки результатов научных экспериментов	Ответы на вопросы к экзамену №28-29, выполнение индивидуального задания, презентация на научных семинарах «Современные спектральные методы исследования», «Современные методы исследования строения и физических свойств молекул»	Показывает алгоритм создания входных файлов для работы с квантово-химическими пакетами с ошибками	Показывает алгоритм создания входных файлов для работы с квантово-химическими пакетами с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Правильно формирует входные файлы для работы с квантово-химическими пакетами
	<b>Владеет</b>	Ответы на	Демонстрирует	Демонстрирует	Демонстрирует

	методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных	вопросы к экзамену №28-29, выполнение индивидуального задания, презентация на научных семинарах «Современные спектральные методы исследования», «Современные методы исследования строения и физических свойств молекул»	навыки анализа экспериментальных данных с ошибками	навыки анализа экспериментальных данных с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	навыки анализа экспериментальных данных, сопоставляет их с расчетными и литературными данными, оценивает достоверность полученных результатов.
--	---	---	--	---	--

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

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

### **3. Вопросы для подготовки к контрольному тестированию (аттестации по итогам освоения дисциплины) и к промежуточному контролю – экзамену:**

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 Каша 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 Ритфелда.
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.

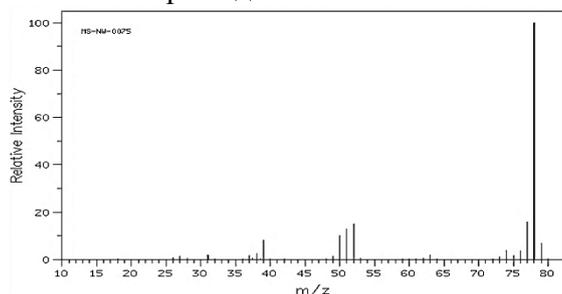
35. Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах.
36. Методы изучения поляризуемости молекул
37. Микроскопические и зондовые методы

#### 4. Примеры индивидуальных заданий

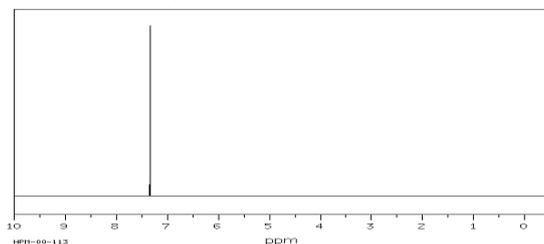
**Индивидуальное задание «Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения»**

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

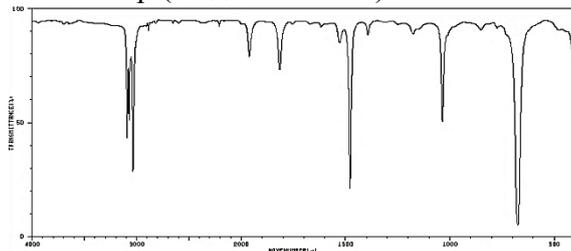
Масс-спектр соединения:



$^1H$  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, <i>ppm</i>	Интенсивность, %	Отнесение линий
7,4	100	H <sub>a</sub>

Таблица 3 – Отнесение полос в ИК спектре соединения

Волновое число, см <sup>-1</sup>	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.

**5.1. Примерные темы сообщений-презентаций на научном семинаре «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.

**5.2. Примерные темы сообщений-презентаций на научном семинаре «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.

**6.1. Вопросы для подготовки к лабораторному коллоквиуму по работе «Определение межъядерного расстояния CO в молекуле CO<sub>2</sub> по колебательно-вращательному спектру воздуха»:**

1. Общая характеристика и классификация спектроскопических методов исследования и диагностики материалов.
2. Вращательные спектры линейных молекул и молекул типа симметричного и асимметричного волчков.
3. Определение геометрических характеристик полярных молекул методом

вращательной спектроскопии.

4. Механизм получения вращательных спектров комбинационного рассеяния.
5. Определение геометрических характеристик неполярных молекул методом КР.
6. Достоинства, недостатки и возможности метода колебательной спектроскопии.
7. Колебательные спектры двухатомных молекул в приближениях гармонический и ангармонический осцилляторы
8. Механизм получения колебательных спектров комбинационного рассеяния.
9. Основные, обертоновые и составные частоты.
10. Механизм возникновения колебательно-вращательных спектров.
11. Правила отбора переходов в ИК и КР спектрах.
12. P-, Q и R-ветви колебательно-вращательной полосы.
13. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул на примере  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$ .
14. Активность колебаний в ИК и КР спектрах.
15. Естественные и нормальные координаты молекул.
16. Коэффициенты кинематического взаимодействия и силовые постоянные.
17. Определение молекулярных характеристик по колебательно-вращательным спектрам двухатомных молекул
18. Определение межъядерного расстояния в молекуле углекислого газа.
19. Подготовка образцов для регистрации спектров.

**6.2. Вопросы для подготовки к лабораторному коллоквиуму по работам «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  $\text{XY}_2$ .
15. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа  $\text{XY}_3$ .
16. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа  $\text{XY}_4$ .
17. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа  $\text{XY}_2$  в координированном состоянии.
18. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа  $\text{XY}_3$  в координированном состоянии.

19. Типы нормальных колебаний ионов и молекул типа XY<sub>4</sub> в координированном состоянии.
20. Спектральные проявления координации CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
21. Спектральные проявления координации HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
22. Спектральные проявления координации SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>-ионов к поверхности оксидных наноматериалов в ИК спектрах.
23. Спектральные проявления координации RCOO<sup>-</sup>-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.

### **6.3. Вопросы для подготовки к лабораторному коллоквиуму по работе «Рентгенофазовый анализ. Качественное и количественное определение компонентов смеси. Индексирование»**

1. Симметрия в кристаллах.
2. Основы дифракции рентгеновских лучей. Обратная решетка.
3. Основные формулы рентгеноструктурного анализа.
4. Основы рентгеноструктурного анализа; пакеты программ для обработки экспериментов.
5. Профильный анализ. Обработка рентгеновского порошкового эксперимента.
6. Рентгенофазовый анализ.
7. Определение параметров элементарных ячеек
8. Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым данным. Метод Ритфельда.
9. Методы рентгеновской дифракции для определения характеристик нано-объектов.
10. Кристаллографические и некристаллографические форматы данных.
11. Банки структурных данных. Программы визуализации молекул и кристаллических структур, статистической обработки данных

### **7. Примеры тестовых вопросов**

1. Кантилевер используется в ... микроскопе
  - a.* сканирующем силовом
  - б.* сканирующем туннельном
  - в.* растровом
  - г.* просвечивающем электронном
  
2. Выберите выражение для энергии колебательного движения двухатомной молекулы

$$\begin{aligned}
 \text{a. } & \frac{E}{hc} = \omega_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 \\
 \text{б. } & \frac{E}{hc} = \omega_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 + B_\nu j(j+1) \\
 \text{в. } & \frac{E}{hc} = B_\nu j(j+1) \\
 \text{г. } & \frac{E}{hc} = T_e + \omega_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 + B_\nu j(j+1)
 \end{aligned}$$

3 Правилу отбора для переходов между вращательными состояниями двухатомных молекул в колебательно-вращательных КР-спектрах соответствует выражение ...

- а.  $\Delta j = 0, \pm 2$
- б.  $\Delta j = +1$
- в.  $\Delta j = \pm 1$
- г.  $\Delta j = 0, +2$
- д.  $\Delta j = 0, \pm 1$
- е.  $\Delta j = 0, +1, +2, +3, \dots$

4 Расстояния между линиями вращательной структуры с увеличением вращательного квантового числа  $j$  во вращательном ИК-спектре в приближении жесткого ротатора ...

- а. равны  $4B_e$  и не зависят от  $j$
- б. равны  $2B_e$  и не зависят от  $j$
- в. уменьшаются
- г. увеличиваются

5 Нормальное колебание двухатомной молекулы  $O_2$  ...

- а. активно только в ИК-спектрах
- б. активно только в КР-спектрах
- в. активно в ИК- и КР-спектрах
- г. не проявляется ни в ИК-, ни в КР-спектрах

6 Для иона  $CO_3^{2-}$  число нормальных колебаний равно ...

- а. 6
- б. 3
- в. 4
- г. 9

7 При координации аниона  $NO_3^-$  к наноструктурированной поверхности металла ...

- а. ИК спектр не меняется
- б. в ИК спектре проявляется валентное полносимметричное колебание аниона

- в.* в ИК спектре имеет место расщепление валентного асимметричного колебания аниона
- г.* симметрия аниона понижается

8 Основными характеристиками спектров ЯМР являются:

- а.* химический сдвиг
- б.* мультиплетность
- в.* поливалентность
- г.* интенсивность

9 В качестве мессбауэровских нуклидов чаще всего используют изотопы ...

- а.*  $^{57}\text{Fe}$  и  $^{119}\text{Sn}$
- б.*  $^{121}\text{Sb}$  и  $^{125}\text{Te}$
- в.*  $^{151}\text{Eu}$  и  $^{197}\text{Au}$
- г.*  $^{125}\text{Te}$  и  $^{151}\text{Eu}$

**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.

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