

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 29.09.2023 09:45:53
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
«25» марта 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность программы магистратуры
Физическая химия и химия твердого тела

Квалификация

Магистр

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..... | 10 |
| 4.4. Самостоятельная работа обучающихся..... | 11 |
| 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине..... | 11 |
| 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации..... | 11 |
| 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины..... | 13 |
| 8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины..... | 13 |
| 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины..... | 13 |
| 10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине..... | 14 |
| 10.1. Информационные технологии..... | 14 |
| 10.2. Программное обеспечение..... | 14 |
| 10.3. Базы данных и информационные справочные системы..... | 14 |
| 11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы..... | 14 |
| 12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья..... | 14 |
| Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации. | |

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

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

| Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Планируемые результаты обучения (дескрипторы) |
|--|---|--|
| <p>ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p> | <p>ОПК-1.О.03.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения</p> | <p>Знать методы и классификацию физико-химических методов исследования Уметь выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач Владеть навыками работы на современных приборах</p> |
| <p>ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p> | <p>ОПК-2.О.03.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии</p> | <p>Знать основные физико-химические законы, правила, закономерности Уметь применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений Владеть навыками формулировки и постановки задач и их математического решения</p> |
| <p>ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для</p> | <p>ОПК-3.О.03.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности</p> | <p>Знать основные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности Уметь пользоваться программными продуктами для решения</p> |

| Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Планируемые результаты обучения (дескрипторы) |
|---|---|---|
| решения задач профессиональной деятельности | | задач профессиональной деятельности Владеть методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных |
| ОПК-4. Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов | ОПК-4.О.03.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности | Знать перечень основных журналов и список текущих конференций, соответствующих области профессиональной деятельности Уметь составлять план публикации, писать публикацию и осуществлять ее научно-техническое сопровождение Владеть навыками работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно-технической и патентной информации |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

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

Изучается на первом курсе, в первом семестре.

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

3. Объем дисциплины.

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

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Занятия лекционного типа, академ. часы | Занятия семинарского типа, академ. часы | | Самостоятельная работа, академ. часы | Формируемые компетенции | Формируемые индикаторы |
|----------|--|---|--|---------------------|---|----------------------------------|--|
| | | | Семинары и/или практические занятия | Лабораторные работы | | | |
| 1. | Общая характеристика и классификация физико-химических методов. | 2 | - | - | 5 | ОПК-1 | ОПК-1.О.03.1 |
| 2. | Спектроскопические методы. Физико-химические основы | 6 | 6 | 20 | 15 | ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4 | ОПК-1.О.03.1 ОПК-2.О.03.1 ОПК-3.О.03.1 ОПК-4.О.03.1 |
| 3 | Резонансные, оптические и другие методы | 24 | 10 | 12 | 37 | ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4 | ОПК-1.О.03.1 ОПК-2.О.03.1 ОПК-3.О.03.1 ОПК-4.О.03.1 |

4.2. Занятия лекционного типа.

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

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

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

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

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

4.3.2. Занятия лабораторного типа.

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

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

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

| № раздела дисциплины | Перечень вопросов для самостоятельного изучения | Объем, акад. часы | Форма контроля |
|----------------------|--|-------------------|--|
| 2 | Выбор темы сообщения-презентации на научном семинаре. Поиск и анализ литературных данных по теме сообщения-презентации. Подготовка к тестированию. Подготовка слайд-презентации доклада к научному семинару «Современные методы исследования строения и свойств молекул». Выполнение индивидуального задания «Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения» | 6 | Проверка слайд-презентации, выступление на научном семинаре. Защита индивидуального задания |
| 3 | Методы термодинамического моделирования фазовых равновесий, открытых и закрытых фазовых процессов Дифференциальное обобщенное уравнение Ван-дер-Ваальса | 10 | Устный опрос |

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

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

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

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

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене:

Вариант №...

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

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

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

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

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

б) электронные учебные издания:

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

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

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

Электронно-библиотечные системы:

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

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

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

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

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

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

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

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

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

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

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

На занятия студент должен 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
«Методы исследования строения и физических свойств веществ»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

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

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

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Показатели сформированности (дескрипторы) | Критерий оценивания | Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов) | | |
|--|--|------------------------------------|--|--|---|
| | | | «удовлетворительно» (пороговый) | «хорошо» (средний) | «отлично» (высокий) |
| ОПК-1.О.03.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения | Знает методы и классификацию физико-химических методов исследования | Ответы на вопросы к экзамену №1-22 | Классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ с ошибками | Классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя | Правильно классифицирует физико-химические методы исследования структуры и физических свойств веществ |
| | Умеет выбирать корректный метод и методику для решения конкретных профессиональных задач | Ответы на вопросы к экзамену №1-22 | Выбирает методы расчета химического и фазового состава с ошибками | Выбирает методы расчета химического и фазового состава с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Правильно выбирает методы расчета химического и фазового состава |
| | Владет навыками работы на современных приборах | Ответы на вопросы к экзамену №1-22 | Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах с ошибками | Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах с помощью | Демонстрирует навыки работы на современных аналитических приборах и анализирует |

| | | | | преподавателя | полученные результаты |
|---|---|---|--|---|--|
| ОПК-2.О.03.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии | Знает основные физико-химические законы, правила, закономерности | Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания | Перечисляет основные расчетные физико-химические формулы, правила, закономерности с ошибками | Перечисляет основные расчетные формулы, правила, закономерности с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя | Правильно перечисляет основные физико-химические расчетные формулы, правила, закономерности |
| | Умеет применять основные уравнения, законы для описания исследуемых процессов и явлений | Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания | Поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям с ошибками | Поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Правильно поясняет особенности применяемых уравнений к объектам, исследуемым процессам и явлениям |
| | Владеет навыками формулировки и постановки задач и их математического решения | Ответы на вопросы к экзамену №23-29, выполнение индивидуального задания | Демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов с ошибками | Демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Правильно демонстрирует навыки применения расчетных физико-химических методов, анализирует полученные результаты |

| | | | | | |
|---|--|---|--|---|---|
| ОПК-3.О.03.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности | Знает основные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности | Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания | Перечисляет особенности работы с программными пакетами с ошибками | Перечисляет особенности работы с программными пакетами с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя | Правильно перечисляет особенности работы с программными пакетами |
| | Умеет пользоваться программными продуктами для решения задач профессиональной деятельности | Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания | Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества с ошибками | Поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Правильно поясняет особенности моделирования структуры молекул с помощью квантово-химических пакетов, фазового и химического состава и структуры вещества |

| | | | | | |
|---|--|---|--|---|--|
| | Владеет методами обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных | Ответы на вопросы к экзамену №30-35, выполнение индивидуального задания | Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных с ошибками | Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Демонстрирует навыки обработки и оценки достоверности полученных экспериментальных данных и анализирует полученные результаты |
| ОПК-4.О.03.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности | Знает перечень основных журналов и список текущих конференций, соответствующих области профессиональной деятельности | Ответы на вопросы к экзамену №36-41 | Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, с ошибками | Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Перечисляет основные журналы, соответствующие области профессиональной деятельности, использует их в научной работе, анализирует полученную информацию |
| | Умеет составлять план публикации, писать публикацию и осуществлять ее научно-техническое сопровождение | Ответы на вопросы к экзамену №36-41 | Показывает навыки составления плана публикации с ошибками | Показывает навыки составления плана публикации с незначительными ошибками, с помощью преподавателя | Правильно составляет план публикации и готовит ее |
| | Владеет навыками работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно-технической и патентной информации | Ответы на вопросы к экзамену №36-41 | Демонстрирует навыки работы в онлайн-редакторах журналов, навыками поиска научно- | Демонстрирует навыки поиска научно-технической и патентной информации по | Правильно находит научно-техническую и патентную информацию по структуре молекул и их свойствам и |

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

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

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

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

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-1 (ОПК-1.О.03.1 Выбор физико-химического метода и методики исследования вещества и приборного обеспечения):

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

б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-2 (ОПК-2.О.03.1 Способность обрабатывать и анализировать экспериментальные данные с помощью законов физической химии):

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

в) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-3 (ОПК-3.О.03.1 Способность проведения расчетов с использованием современных программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности):

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

г) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-4 (ОПК-4.О.03.1 Способность подготовки публикаций и презентаций по результатам профессиональной деятельности):

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

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

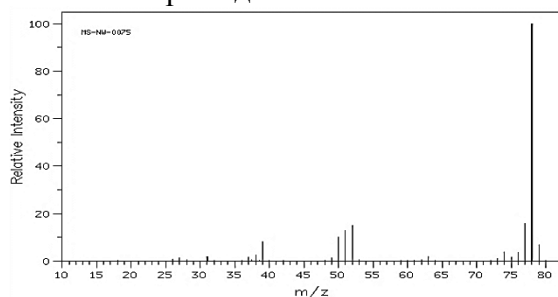
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

4. Пример индивидуального задания

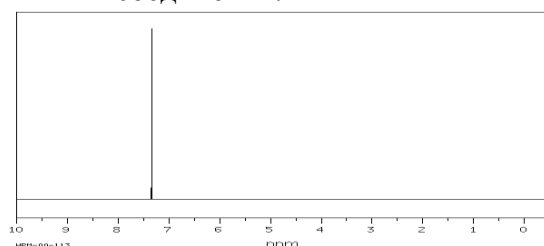
Индивидуальное задание - Определение структуры соединения по данным масс-спектрометрии, спектрам протонного ядерного магнитного резонанса и инфракрасным спектрам поглощения

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

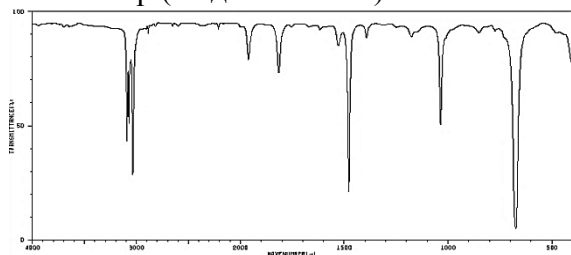
Масс-спектр соединения:



1H ЯМР соединения:



ИК спектр (жидкая пленка):



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

Таблица 1 – Отнесение линий масс-спектра соединения

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

Таблица 2 – Отнесение линий спектра 1H ЯМР соединения

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

Таблица 3 – Отнесение полос в ИК спектре соединения

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

3. Сделать вывод о структуре соединения.

5. Примерные темы курсовых работ

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

6. Примерные темы сообщений на научном семинаре:

К научному семинару «Современные спектральные методы исследования»:

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

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

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

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

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

7. Вопросы для подготовки к коллоквиуму

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

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

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

8. Вопросы для подготовки к тестированию

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

молекул.

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

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

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

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

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