

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по
УР

_____ А.Е. Рудин

« 04 » ____ 04 ____ 2023 года

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.20

Физические методы исследования в химии

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Лаб. занятия				
5	УП	34	34	39,75	0,25	3	Зачет
	РПД	34	34	39,75	0,25	3	
Итого	УП	34	34	39,75	0,25	3	
	РПД	34	34	39,75	0,25	3	

Санкт-Петербург
2023

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

доктор химических наук, Заведующий кафедрой

Новоселов
Петрович

Николай

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

Новоселов Николай
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области физико-химических методов исследования для инструментальной оценки показателей качества и безопасности производимой продукции.

1.2 Задачи дисциплины:

- сформировать понимание значимости физических методов исследования для решения современных научных и прикладных задач, показать тенденции развития методов;
- дать представление об инструментальной базе физических методов исследования;
- на примере классических физических методов познакомить с наиболее общими правилами проведения

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

- Физика
- Информационные технологии
- Математика
- Общая и неорганическая химия
- Аналитическая химия
- Органическая химия
- Вычислительные методы в химии

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-2: Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности

Знать: теоретические принципы, лежащие в основе хромато-масс-спектрометрии, ИК- спектрометрии, ЯМР и ПМР-спектрометрии; основные положения теории колебательной спектроскопии, виды колебательных спектров, происхождение колебательных спектров, аналитические возможности колебательной спектроскопии; основные параметры спектров ЯМР и причины, обуславливающие их вариации; технологию решения прямых и обратных спектральных задач применительно к ЯМР, основы интерпретации спектров ЯМР

Уметь: интерпретировать данные, полученные методами ИКС, ЯМР; выявлять характеристические полосы поглощения различных структурных и функциональных групп в органическом соединении; идентифицировать органические соединения по ИК-спектрам; решать прямые спектральные задачи; определять число и относительную интенсивность всех сигналов в спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C , устанавливать химические сдвиги для сигналов атома углерода и атома водорода

Владеть: навыками описания структуры органических молекул, используя данные ИК- спектроскопии, ЯМР и ПМР спектрометрии

ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

Знать: базовые теоретические принципы использования физических методов в химических исследованиях

Уметь: проводить анализ и статистическую обработку экспериментальных данных химических объектов, полученных с помощью физических методов

Владеть: навыками обработки экспериментальных данных химических объектов, полученных с помощью физических методов

<p>Тема 4. Вещественный и молекулярный анализ</p> <p>Оптическая спектроскопия: отражательно-адсорбционная инфракрасная спектроскопия, комбинационного рассеяния, мессбауэровская (гамма-резонансная) спектроскопия, адсорбционная и эмиссионная масс-спектрометрия, рэлеевское рассеяние мессбауэровского излучения, мессбауэровская спектроскопия конверсионных электронов.</p> <p>Инфракрасная и романовская спектроскопия. Основы методов колебательной спектроскопии. Техника эксперимента. Аналитическая информация. Применение для структурного анализа.</p> <p>Спектроскопия ядерно-магнитного резонанса. Физические основы спектроскопии ЯМР. Информация, получаемая из химических сдвигов. Информация, получаемая из констант спин-спинового взаимодействия. Специальные методы отнесения сигналов ядер ^1H и ^{13}C.</p> <p>Лабораторные работы: Оптическая спектроскопия</p>	10	8	10	ГД	
<p>Раздел 3. Спектроскопические методы исследования</p>					
<p>Тема 5. Локальный анализ и анализ поверхности</p> <p>Фотонно-зондовые методы. Эмиссионная спектроскопия.</p> <p>Электронно-зондовые методы. Основы теории электронно-зондовых методов.</p> <p>Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия. Аналитическая электронная микроскопия.</p> <p>Электронная спектроскопия: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, ультрафиолетовая электронная спектроскопия. Электронная оже-спектроскопия.</p> <p>Ионно-зондовые методы. Методы, основанные на рассеянии ионов. Масс-спектрометрия вторичных ионов.</p> <p>Полевые зондовые методы. Полевой электронный микроскоп. Полевой ионный микроскоп.</p> <p>Методы сканирующей зондовой спектроскопии. Сканирующая туннельная микроскопия. Атомная-силовая и магнитно-силовая микроскопия.</p> <p>Лабораторная работа: эмиссионная спектроскопия</p>	10	8	4		,Ко

Тема 6. Структурный анализ Рентгеновская дифракция. Дифракция медленных электронов. Дифракция быстрых электронов. Дифракция на кристаллах. Дифракция на порошках. Анализ кристаллической структуры. Рентгеновская спектроскопия. Рассеяние на аморфных и частично упорядоченных объектах. Малоугловое рентгеновское рассеяние. Рентгеновская спектроскопия поглощения: EXAFS, XANES, NEXAFS. Лабораторная работа: Рентгеновская дифракция		6	4	11,75	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		34	34	39,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25				
Всего контактная работа и СР по дисциплине		68,25		39,75		

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-2	Формулирует современное представление о теоретических основах и практическом применении наиболее важных физических, химических и физико-химических методов анализа, оценивает возможности различных аналитических методов, их достоинства и недостатки, Оценивает качество товаров физическими, химическими и физико-химическими методами анализа	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания
ОПК-4	Раскрывает порядок применения физических, химических, и физико-химических методов и обоснованно подходит к выбору оптимального метода анализа тех или иных объектов в зависимости от поставленных задач Осуществляет анализ и проводит статистическую обработку результатов аналитических определений Обрабатывает результаты химического эксперимента с помощью современных вычислительных методов	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает всестороннее, систематическое и глубокое знание основного и дополнительного учебного материала, правильно решает тестовое и практическое задание; усвоил основную и знаком с дополнительной рекомендованной литературой	
Не зачтено	Обучающийся показывает незнание основного учебного материала, допускает принципиальные ошибки при ответе.	

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 5	
1	Общая характеристика физических методов исследования
2	Требования, предъявляемые к методам анализа (правильность, воспроизводимость, точность анализа, предел обнаружения, избирательность, специфичность).
3	Различие между методикой и методом анализа. Преимущество физико-химических методов анализа
4	Ошибки в количественном анализе (абсолютная ошибка, относительная ошибка, случайная ошибка, систематическая ошибка, промах).
5	Классификация физических методов анализа.
6	Оптические (спектральные) методы анализа и их классификация.
7	Основные характеристики и природа света как электромагнитного излучения
8	Области электромагнитного спектра. Монохроматическое и полихроматическое излучение.
9	Определение структуры соединения по его ИК-спектру.
10	Активационный анализ. Основы методы.
11	Масс-спектрометрия, основы метода
12	Рентгенофлуоресцентная спектроскопия
13	Инфракрасная и романовская спектроскопия
14	Спектроскопия ядерно-магнитного резонанса
15	Фотонно-зондовые методы
16	Эмиссионная спектроскопия
17	Электронно-зондовые методы
18	Ионно-зондовые методы
19	Методы сканирующей зондовой спектроскопии
20	Рентгеновская дифракция
21	Рентгеновская спектроскопия

5.2.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрены

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Рассчитать и изобразить схему рентгенограммы в масштабе 1:1, если ось вращения кристалла [uvw]. Рентгенограмма снимается в камере РКВ-86, диаметр камеры 86 мм, высота кассеты с пленкой $2h=120$ мм, концы пленки сходятся у тубуса, центр рентгенограммы совпадает со следом первичного пучка, излучение К.

2. По представленным спектрам (ИК, ¹H-ЯМР, ¹³C-ЯМР) определить к какому классу принадлежит данное вещество. Установить его структурную формулу. Подтвердить химические сдвиги протонов в веществе по данным ¹H-ЯМР спектра расчетом химических сдвигов протонов по табличным значениям инкрементов заместителей. Инфракрасный спектр (ИК, ¹H-ЯМР, ¹³C-ЯМР-спектры прилагаются).

3. Может ли ион с максимальной массой быть молекулярным и обусловить образование следующего ряда фрагментов: 130, 129, 126, 120, 113, 100.

Аргументируйте свой ответ. Определите строение соединения по представленному масс-спектру. Молекулярный вес соединения 156, интенсивность линии иона (M + 1)⁺ составляет 2,4 % от интенсивности линии молекулярного иона M⁺.

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная + Письменная Компьютерное тестирование Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

На подготовку ответа предоставляется 0,5 часа.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Луков, В. В., Щербаков, И. Н.	Физические методы исследования в химии	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета	2016	https://www.iprbooks.hop.ru/78713.html
Луков, В. В., Щербаков, И. Н.	Физические методы исследования в химии	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета	2016	http://www.iprbookshop.ru/78713.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Хребтова, С. Б., Телешев, А. Т., Ярышев, Н. Г.	Физические методы исследования вещества. Задания для самостоятельной работы студентов. Часть 1. Спектроскопия ЯМР и ЭПД	Москва: Московский педагогический государственный университет	2015	https://www.iprbooks.hop.ru/70160.html
Ярышев, Н. Г., Медведев, Ю. Н., Токарев, М. И., Бурихина, А. В., Камкин, Н. Н.	Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе	Москва: Прометей	2015	http://www.iprbookshop.ru/58227.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.
5. Материалы Информационно-образовательной среды заочной формы обучения СПбГУПТД [Электронный ресурс]. URL:http://sutd.ru/studentam/extramural_student/.

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional
Microsoft Windows

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лабораторные занятия проводятся в лаборатории, оснащенной следующим оборудованием:

Вытяжные шкафы
Настольное и напольное оборудование
Шкаф с лабораторной посудой
Мойки
Сушильный шкаф
Муфельная печь
Аналитические весы
рН-метр
Иономер
Кондуктометр
Фотоэлектроколориметр
Спектрофотометр
ИК-спектрофотометр
Рефрактометр
Поляриметр

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска