

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ ИМ. Л.Ф. ВЕРЕЩАГИНА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФВД РАН)**

ПРИНЯТО

На Ученом совете ИФВД РАН
Протокол № 6 от 30.11.2020



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Современные методы анализа вещества»

наименование

Направление подготовки	03.06.01 Физика и астрономия
Направленность (профиль)	«Физика конденсированного состояния» (01.04.07)
ООП	
Квалификация	«Исследователь. Преподаватель-исследователь»
Форма обучения	очная
Год приема	2020

Программа дисциплины «Современные методы анализа вещества» разработана на основании следующих нормативных документов:

- Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования, утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от «30» июля 2014 г № 876. по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия», с изменениями и дополнениями от 30 апреля 2015 г;

- Программа кандидатского минимума и паспорт научной специальности 01.04.07 — Физика конденсированного состояния, разработанный экспертным советом Высшей аттестационной комиссии Министерства в связи с утверждением приказа Министерства образования и науки Российской Федерации от «23» октября 2017 г. № 1027 «Об утверждении Номенклатуры научных специальностей, по которым присуждаются ученые степени».

Составитель: д.ф.-м.н. Фомин Ю.Д.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения аспирантами дисциплины «Современные методы анализа вещества» является изучение основ теории и практики физико-химического анализа веществ, основных экспериментальных закономерностей, лежащих в основе физико-химических методов исследования, их связи с современными технологиями, а также формирование у аспирантов компетенций, позволяющих осуществлять идентификацию органических соединений основываясь на данных разных физических методов исследования молекул.

1.2. Задачи освоения дисциплины:

- формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования физико-химических свойств и структуры веществ;
- овладение методологией основных методов физических исследований.

Для достижения задач, поставленных при изучении дисциплины, используется набор методических средств: учебная, учебно-методическая литература, информационные ресурсы библиотеки, электронные курсы и др.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП АСПИРАНТУРЫ

2.1. Учебная дисциплина «Современные методы анализа вещества» входит в Блок (Дисциплины по выбору) и относится к вариативной части ООП по направлению подготовки 03.06.01 - Физика и астрономия, направленность «Физика конденсированного состояния» (01.04.07). Индекс дисциплины по учебному плану — Б1.В.ДВ.1.1. Дисциплина изучается на 2 курсе.

2.2. Актуальность курса обусловлена большой практической значимостью физических явлений в конденсированных средах и необходимостью создания различного рода устройств и приборов, основанных на использовании явлений в твёрдых телах, гетерогенных структурах и кристаллах. Изучение данной дисциплины базируется на следующих дисциплинах подготовки бакалавров, специалистов или магистров: «Физика», «Химия», «Кристаллография», «Физика твердого тела», «Информатика», «Программирование».

В результате освоения дисциплины «Современные методы анализа вещества» обучающийся должен:

Знать:

- базовую терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования;
- классификацию методов;
- основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов.

Уметь:

- продемонстрировать связь между различными физико-химическими методами исследования, структурой и свойствами веществ;
- осуществить выбор соответствующего физико-химического метода исследования в зависимости от структуры вещества и поставленной задачи;
- использовать закономерности физико-химических процессов и физико-химические методы исследования при выполнении курсовых и работ и интерпретации экспериментальных данных;
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач;
- применять соответствующие программные продукты для обработки данных.

Владеть:

- навыками решения задач установления структуры соединения по данным физических методов исследования молекул;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории, в библиотеке и Интернете;

- культурой постановки и проведения эксперимента при использовании научного оборудования;
- навыками грамотной обработки результатов экспериментов и сопоставления с теоретическими и литературными данными;
- практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач.

Основные положения дисциплины могут быть использованы в дальнейшем при прохождении научно-исследовательской практики и государственной итоговой аттестации.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины «Современные методы анализа вещества» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

- универсальных (УК-1, УК-3, УК-4);
- общепрофессиональных (ОПК-1);
- профессиональных (ПК-1, ПК-2, ПК-3).

Таблица 1.
Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
УК-1	ИУК-1.1.1 о современных научных достижениях, генерировании новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	ИУК-1.2.1 проявлять способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	ИУК-1.3.1 способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-3	ИУК-3.1.1 об участии в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач	ИУК-3.2.1 принимать участие в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач	ИУК-3.3.1 готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач
УК-4	ИУК-4.1.1 современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	ИУК-4.2.1 использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	ИУК-4.3.1 готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках
ОПК-1	ИОПК-1.1.1 о способности самостоятельно	ИОПК-1.2.1 самостоятельно осуществлять научно-	ИОПК-1.3.1 способностью самостоятельно

	осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ПК-1	ИПК-1.1.1 о применении современных и перспективных методов исследования и решении профессиональных задач с учетом мировых тенденций развития области науки в соответствии с направленностью программы	ИПК-1.2.1 самостоятельно проводить научно-исследовательскую работу с применением современных и перспективных методов исследования и решать профессиональные задачи с учетом мировых тенденций развития области науки в соответствии с направленностью программы	ИПК-1.3.1 способностью к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы с применением современных и перспективных методов исследования и решению профессиональных задач с учетом мировых тенденций развития области науки в соответствии с направленностью программы
ПК-2	ИПК-2.1.1 о способности анализировать результаты научных исследований и представлять их в виде докладов, статей, готовности применять на практике навыки составления и оформления научных отчетов и научно-технической документации	ИПК-2.2.1 анализировать результаты научных исследований и представлять их в виде докладов, статей, применять на практике навыки составления и оформления научных отчетов и научно-технической документации	ИПК-2.3.1 способностью анализировать результаты научных исследований и представлять их в виде докладов, статей, готовностью применять на практике навыки составления и оформления научных отчетов и научно-технической документации
ПК-3	ИПК-3.1.1 о способности использовать профессионально-профилированные навыки и знания в области информационных технологий, программного обеспечения и ресурсов сети Интернет для обработки и	ИПК-3.2.1 использовать профессионально-профилированные навыки и знания в области информационных технологий, программного обеспечения и ресурсов сети Интернет для обработки и анализа полученных научных результатов	ИПК-3.3.1 способностью использовать профессионально-профилированные навыки и знания в области информационных технологий, программного обеспечения и ресурсов сети Интернет для обработки и

	анализа полученных научных результатов		анализа полученных научных результатов
--	--	--	--

Профессиональные компетенции выпускника программы аспирантуры по направлению подготовки «Физика и астрономия», направленность «Физика конденсированного состояния» 01.04.07 осваиваются в течение всего периода обучения в рамках дисциплин вариативной части и научно-исследовательской практики независимо от формирования других компетенций, и обеспечивают реализацию обобщенной трудовой функции «Проводить научные исследования и реализовывать проекты». Для того чтобы формирование профессиональных компетенций было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы аспирантуры, должен:

ЗНАТЬ: классификацию методов; основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов.

УМЕТЬ: осуществить выбор соответствующего физико-химического метода исследования в зависимости от структуры вещества и поставленной задачи; использовать закономерности физико-химических процессов и физико-химические методы исследования при выполнении курсовых и работ и интерпретации экспериментальных данных.

ВЛАДЕТЬ: навыками решения задач установления структуры соединения по данным физических методов исследования молекул.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, в том числе 42 часа, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 26 часов – лекции, 16 часов – практические, семинарские занятия), 62 часа – на самостоятельную работу обучающихся и 4 часа – на контроль.

Таблица 2.

Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела, темы	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа (в часах)			Самостоят. работа	Контроль	Формы текущего контроля успеваемости (по темам) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Л	ПЗ	ЛР			
1	Общая характеристика физических методов исследования веществ	3	1-9	6	2		14		участие аспирантов в научных семинарах
2	Метод ЯМР спектроскопии	3	10-17	6	2		12		представление докладов на научные конференции
3	Метод ИК-спектроскопии	4	20-28	6	4		12		подготовка научных статей
4	Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях	4	29-37	4	4		12		подготовка презентаций по литературе и по теме исследований
5	Метод динамического светорассеивания	4	38-44	4	4		12		освоение новых средств автоматизации и компьютеризации выполняемых научных исследований
6	Зачет	3	9-10					4	проведение зачета
ИТОГО				26	16		62	4	ЗАЧЕТ

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, ЛР – лабораторные работы;
СР – самостоятельная работа по отдельным темам

Таблица 3.
Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины и формируемых в них компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции							общее количество компетенций
		УК -1	УК -3	УК -4	ОПК -1	ПК -1	ПК -2	ПК- 3	
<i>Тема 1</i>	22	+	+	+	+	+	+	+	7
<i>Тема 2</i>	20	+	+	+	+	+	+	+	7
<i>Тема 3</i>	22	+	+	+	+	+	+	+	7
<i>Тема 4</i>	20	+	+	+	+	+	+	+	7
<i>Тема 5</i>	20	+	+	+	+	+	+	+	7
<i>Тема 6</i>	4	+	+	+	+	+	+	+	7
Итого	108								

Содержание тем дисциплины

Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ:

Метод ЯМР спектроскопии. Метод ИК - спектроскопии. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях. Эмиссионная спектроскопия.

Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии:

Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР первого и не первого порядков. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента.

Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР. Характер образцов.

Тема 3. Метод ИК - спектроскопии:

Описание колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Техника и методики ИК спектроскопии. Аппаратура ИК спектроскопии, приготовление образцов.

Тема 4. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях, эмиссионная спектроскопия:

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных

молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов.

Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и

количественном анализах. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем в электронных спектрах поглощения.

Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый выход люминесценции). Закономерности люминесценции. Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа.

Тема 5. Метод динамического светорассеяния:

Динамическое рассеяние света. Основы теории. Интенсивность рассеяния света. Использование корреляционной функции для определения размера частицы. Размерные распределения по интенсивности, объему и числу. Аппаратура в методе динамического светорассеяния. Анализаторы серии Zetasizer Nano.

Методика проведения исследования для измерения размера частиц.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных, практических (семинарских) и лабораторных занятий с перечнем учебно-методического обеспечения.

Основные формы занятий по дисциплине - лекции и практические занятия.

Лекция представляет собой систематичное, последовательное устное изложение преподавателем определенного раздела учебной дисциплины. Слушание лекции предполагает активную мыслительную деятельность аспирантов, главная задача которых - понять сущность рассматриваемой темы, уловить логику рассуждений лектора; размышляя вместе с ним, оценить его аргументацию, составить собственное мнение об изучаемых проблемах и соотнести услышанное с тем, что уже изучено. И при этом аспиранты должны еще успевать делать записи изложенного в лекции материала.

Ведение конспектов является творческим процессом и требует определенных умений и навыков. Целесообразно следовать некоторым практическим советам: формулировать мысли кратко и своими словами, записывая только самое существенное; учиться на слух отделять главное от второстепенного; оставлять в тетради поля, которые можно использовать в дальнейшем для уточняющих записей, комментариев, дополнений; постараться выработать свою собственную систему сокращений часто встречающихся слов (это дает возможность меньше писать, больше слушать и думать).

Сразу после лекции полезно просмотреть записи и по свежим следам восстановить пропущенное, дописать недописанное. Важно уяснить, что лекция - это не весь материал по изучаемой теме, который дается аспирантам для его «зубрежки». Прежде всего, это – «путеводитель» аспирантам в их дальнейшей самостоятельной учебной и научной работе. Практическое занятие - это особая форма учебно-теоретических занятий, которая, как правило, служит дополнением к лекционному курсу. Его отличительной особенностью является активное участие самих аспирантов в объяснении вынесенных на рассмотрение проблем, вопросов. Преподаватель дает возможность аспирантам свободно высказаться по обсуждаемому вопросу и только помогает им правильно построить обсуждение.

Аспиранты заблаговременно знакомятся с планом семинарского занятия и литературой, рекомендуемой для изучения данной темы, чтобы иметь возможность подготовиться к семинару. При

подготовке к занятию необходимо: проанализировать его тему, подумать о цели и основных проблемах, вынесенных на обсуждение; внимательно прочитать конспект лекции по этой теме; изучить рекомендованную литературу, делая при этом конспект прочитанного или выписки, которые понадобятся при обсуждении на семинаре; постараться сформулировать свое мнение по каждому вопросу и аргументированно его обосновать.

Практическое занятие помогает аспирантам глубоко овладеть предметом, способствует развитию умения самостоятельно работать с учебной литературой и документами, освоению аспирантами методов научной работы и приобретению навыков научной аргументации, научного мышления. Преподавателю же работа аспирантов на семинаре позволяет судить о том, насколько успешно они осваивают материал курса.

Перечень учебно-методического обеспечения.

1. В.А. Бурилов, Л.З.Латыпова, О.А.Мостовая, Л.С.Якимова, Г.А.Чмутова Современные физико-химические методы исследования в органической химии - Казань, Казан. ун-т, 2017. 131 с. <http://www.ccp4.ac.uk/>
2. Дифракционный структурный анализ. А.С. Илюшин, А.П. Орешко. 2017 г. М.: физический факультет МГУ, Издательский дом «Крепостновъ». 616 с.
3. Спектроскопия ЯМР в органической химии, Каратаева Фарида Хайдаровна; Клочков Владимир Васильевич, 2016 г. <http://vina.scripps.edu>
4. Физические методы исследования в химии, Пентин Юрий Андреевич, Вилков Лев Васильевич, 2018 г.
5. Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов. - Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2018. - 254 с.
6. Хельтье Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зиппель, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2019. — 318 с.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Самостоятельная работа аспирантов является одним из основных видов учебной деятельности и предполагает изучение вопросов, не вошедших в основной план занятий.

Внеаудиторная самостоятельная работа аспирантов в вузе не менее важна, чем обязательные учебные занятия. Ее успешность во многом определяется тем, насколько умело, рационально сам учащийся сможет организовать свои индивидуальные занятия, насколько регулярными и своевременными они будут.

Задания и методические указания для различных видов самостоятельной работы разрабатываются с учетом её специфики, особенностей изучаемых тем, наличия учебной и методической литературы.

Систематическое освоение аспирантами необходимого учебного материала, своевременное выполнение предусмотренных учебных заданий, регулярное посещение лекционных и практических занятий позволяют подготовиться к успешному прохождению промежуточной аттестации по данной дисциплине.

В ходе самостоятельной работы аспиранты должны осуществлять:

- подготовку к занятиям, включая изучение лекций и литературы по теме занятия (используются лекции и источники, представленные в перечне основной и дополнительной литературы, а также электронные ресурсы);
- выполнение индивидуальных домашних заданий по теме прошедшего занятия;

- подготовку реферата (индивидуальные задания по слабо усвоенным темам), в том числе самостоятельное изучение части теоретического материала по темам, которые заявлены в теме реферата (используются источники, представленные в перечне основной и дополнительной литературы, а также электронные ресурсы).

К самостоятельной работе аспирантов также относятся: чтение основной и дополнительной литературы – самостоятельное изучение материала по рекомендуемым литературным источникам; работа с библиотечным каталогом, самостоятельный подбор необходимой литературы; работа со словарем, справочником; поиск необходимой информации в сети Интернет; конспектирование источников; реферирование источников; составление аннотаций к прочитанным литературным источникам; составление рецензий и отзывов на прочитанный материал; составление обзора публикаций по теме; составление и разработка терминологического словаря; составление библиографии (библиографической картотеки); подготовка к различным формам текущей и промежуточной аттестации (к тестированию, контрольной работе, зачету, экзамену); выполнение домашних контрольных работ; самостоятельное выполнение практических заданий репродуктивного типа (ответы на вопросы, задачи, тесты; выполнение творческих заданий).

Таблица 4.
Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1	Общая характеристика физических методов исследования веществ	14	Реферат
2	Метод ЯМР спектроскопии	12	Эссе
3	Метод ИК-спектроскопии	12	Конспектирование
4	Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях	12	Контрольная работа
5	Метод динамического светорассеивания	12	Реферат

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно

Реферат – продукт самостоятельной работы аспиранта, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно-исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее.

Порядок работы над рефератом.

1. Выбор темы.
2. Подбор и изучение литературы.
4. Составление плана реферата.
5. Изложение основного содержания по плану реферата.
6. Оформление и научно-справочный аппарат.

Общий объем работы – 15-30 страниц печатного текста (с учетом титульного листа, содержания и списка литературы) на бумаге формата А4. В тексте должны композиционно выделяться структурные части работы, отражающие суть исследования: введение, основная часть и заключение, а также заголовки и подзаголовки. Реферат должен быть выполнен на одной стороне листа белой бумаги формата А4. Интервал межстрочный – полуторный (1,5). Цвет шрифта – черный. Гарнитура шрифта основного текста – Times New Roman. Кегль (размер шрифта) – 14. Размеры полей страницы (не менее): правое – 30 мм, верхнее, нижнее и левое – 20 мм. Формат абзаца: полное выравнивание (по ширине). Отступ красной строки одинаковый по всему тексту, рекомендуется 1,25 см. Страницы должны быть пронумерованы с учетом титульного листа, который не обозначается цифрой. В работах

могут использоваться цитаты, статистические материалы. Эти данные оформляются в виде сносок (ссылок и примечаний). Все сноски и подстрочные примечания располагаются на той же странице, к которой они относятся, нумерация сносок устанавливается заново на каждой странице. Размер шрифта для названия главы – 16 (полужирный), подзаголовка — 14 (полужирный). Точка в конце заголовка, располагаемого посередине листа, не ставится. Заголовки не подчёркиваются. Оглавление (содержание) должно быть помещено в начале работы, а список литературы в конце реферата.

Эссе – это средство, позволяющее оценить умение обучающегося письменно излагать суть поставленной проблемы, самостоятельно проводить анализ этой проблемы с использованием концепций и аналитического инструментария соответствующей дисциплины, делать выводы, обобщающие авторскую позицию по поставленной проблеме. При написании эссе аспирантам предстоит работать с высказываниями историков и современников о событиях и деятелях отечественной истории. Нужно выбрать одно, которое станет темой эссе. Задача – сформулировать собственное отношение к данному утверждению и обосновать его аргументами. При выборе темы эссе аспирант должен исходить из того, что:

- ясно понимаете смысл высказывания (не обязательно полностью или даже частично быть согласным с автором, но необходимо понимать, что именно он утверждает);
- можете выразить свое отношение к высказыванию (аргументированно согласиться с автором либо полностью или частично опровергнуть его высказывание);
- располагаете конкретными знаниями (факты, статистические данные, примеры) по данной теме;

- владеете терминами, необходимыми для грамотного изложения своей точки зрения.

При написании работы аспиранту следует руководствоваться следующими критериями:

- обоснованность выбора темы (объяснение выбора темы и задач, которые ставит перед собой в своей работе участник) – 1 балл;
- творческий характер восприятия темы, ее осмысления – 1 балл;
- грамотность использования исторических фактов и терминов – 1 балл;
- четкость и доказательность основных положений работы – 1 балл;
- знание различных точек зрения по избранному вопросу – 1 балл.

Конспектирование. Конспект – это систематизированное, логичное изложение материала источника. Различаются четыре типа конспектов:

План-конспект – это развернутый детализированный план, в котором достаточно подробные записи приводятся по тем пунктам плана, которые нуждаются в пояснении.

Текстуальный конспект – это воспроизведение наиболее важных положений и фактов источника.

Свободный конспект – это четко и кратко сформулированные (изложенные) основные положения в результате глубокого осмысливания материала. В нем могут присутствовать выписки, цитаты, тезисы; часть материала может быть представлена планом.

Тематический конспект – составляется на основе изучения ряда источников и дает более или менее исчерпывающий ответ по какой-то схеме (вопросу). Данный тип конспектирования рекомендуется при подготовке к вопросам семинарского занятия.

Контрольная работа является одной из форм самостоятельного изучения аспирантами программного материала по всем предметам. Её выполнение способствует расширению и углублению знаний, приобретению опыта работы со специальной литературой.

Контрольные работы обычно включают практические задания, тесты, задачи и т.п. Для выполнения контрольной работы аспиранту предлагается один из вариантов заданий, также он получает указания или рекомендации к выполнению контрольной работы в устном (консультация) или печатном (методическое пособие) виде. Сдача контрольной работы происходит в установленные преподавателем сроки.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

6.1. Образовательные технологии

Интерактивная лекция, проблемное изложение, технология «Дебаты».

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ на проверку, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.);
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование электронной почты преподавателя;
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс).

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

- Программное обеспечение

Наименование программного обеспечения	Официальный сайт
LAMMPS	http://lammps.sandia.gov/
QUANTUM ESPRESSO	https://www.quantum-espresso.org/
XDS	http://xds.mpimf-heidelberg.mpg.de
Autodock Vina	http://vina.scripps.edu
Pymol	https://pymol.org
Nova PX	https://www.ntmdt-si.com/
АнНа (Анализатор Наночастиц)	https://crys.ras.ru/strukturainstituta/nauchnye-podrazdeleniyawotdelelektronnoj-kristallografii/laboratoriyaelektronografii

- Современные профессиональные базы данных, информационные справочные системы

РИНЦ	https://elibrgru.ru/orgs.asp
Web of Science	http://apps.webofknowledge.com
Scopus	https://www.scopus.com/home.uri
Google Scholar citations	https://scholar.google.ru
IOP Institute of Physics	https://www.io.or
AIP Материалы компании American Institute of Physics	https://www.aip.org/
CASC Материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных CASC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases

APS Журналы Американского физического общества база данных APS Online Journals	https://www.aps.org/
IEEE Материалы компании The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc, а именно база данных IEEE/IEL	http://ieeexplore.ieee.org/Xplore/home.jsp
RSC материалы Royal Society of Chemistry	http://pubs.rsc.org/
Wiley Материалы компании John Wiley & Sons Ltd., а именно база данных Wiley Journals	http://onlinelibrary.wiley.com/
Inspec Материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных INSPEC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases/inspec
ProQuest Материалы компании PROQUEST LLC, а именно база данных Proquest Dissertations and Theses Global	https://www.proquest.com/productsservices/pqdtglobal.html
SpringerNature Зарубежные электронные ресурсы издательства, а именно: Springer Journals Springer Protocols Springer Materials Springer Reference zbMATH Nature Journals Nano Database	http://link.springer.com/ http://www.springerprotocols.com/ http://materials.springer.com/ http://link.springer.com/search?facet-contenttype=%22ReferenceWork%22 http://zbmath.org/ http://npg.com/ https://nano.nature.com
Elsevier B.V. Science Direct Complete Freedom Collection зарубежные электронные ресурсы издательства Elsevier «Freedom Collection» и коллекция электронных книг «Freedom Collection eBook collection», размещенных на платформе Science Direct	https://www.elsevier.com/
CCDC Cambridge Crystallographic Data Centre зарубежные электронные ресурсы Кембриджского центра структурных данных.	https://www.ccdc.cam.ac.uk/

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Современные методы анализа вещества» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой тем.

Таблица 5.
Соответствие разделов, тем дисциплины,
результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые темы дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
1	Общая характеристика физических методов исследования веществ	УК-1, УК-3, УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2, ПК-3	Контрольная работа №1, эссе, реферат.
2	Метод ЯМР спектроскопии	УК-1, УК-3, УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2, ПК-3	Тест №1, эссе, реферат.
3	Метод ИК-спектроскопии	УК-1, УК-3, УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2, ПК-3	Контрольная работа №2, эссе, реферат.
4	Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях	УК-1, УК-3, УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2, ПК-3	Тест №2, эссе, реферат.
5	Метод динамического светорассеивания	УК-1, УК-3, УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2, ПК-3	Контрольная работа №3 эссе, реферат.

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Таблица 6.
Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов

2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры
----------------------------	---

Таблица 7.

Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание

7.3. Контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ

Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии

Примерные вопросы:

1. На каком явлении основан метод ЯМР-спектроскопии?
2. Какие ядра атомов могут вызывать сигнал в спектрах ЯМР?
3. Что называется резонансной частотой ядра?
4. Что называется временем спин-решеточной релаксации?
5. Что представляет собой спектр ЯМР?
6. Что называется химическим сдвигом сигнала ЯМР? В каких единицах измеряется химический сдвиг?
7. На чем основано явление анизотропии?
8. Чем вызвано расщепление сигнала ЯМР?
9. Что отражает мультиплетность сигнала?
10. Что отражает интенсивность мультиплета?
11. Что отражает константа спин-спинового взаимодействия? От каких факторов она зависит, в каких единицах измеряется?
12. Какие протоны называются магнитно-эквивалентными?
13. Что называется спиновой системой?
14. Какие методы для упрощения сложных спектров Вам известны?
15. Что называется химическим обменом? От каких факторов может зависеть скорость химического обмена? Какое отражение в спектрах ЯМР находит химический обмен?
16. Почему в спектре ЯМР ^{13}C все сигналы являются синглетами (в молекуле нет других магнитно активных ядер)?

Тема 3. Метод ИК-спектроскопии

Тема 4. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях; эмиссионная спектроскопия

Примерные вопросы:

- 1 Какие виды электронных переходов характеризуют спектры поглощения в УФ- диапазоне?
- 2 Запишите закон Бугера-Ламберта-Бера и объясните смысл входящих в него величин.
- 3 Как изменится оптическая плотность раствора, если его концентрация уменьшится в 2 раза?
- 4 В чем заключается правило Лёвшина?
- 5 Поясните, в чем заключается Стоксово смещение?
- 6 Как изменится оптическая плотность раствора при увеличении толщины светопоглощающего слоя (увеличении толщины кюветы)?
- 7 Оптические плотности трёх исследуемых растворов равны 0,1; 0,44; 0,8. В каком случае относительная ошибка измерения будет наибольшей?
- 8 Какие из указанных соединений имеют полосы поглощения в УФ- диапазоне: NaNO_3 , Na_2CO_3 , $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$, $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$?
- 9 В кювете из какого материала следует измерять спектры поглощения в УФ-диапазоне?
- 10 В чем различие спектров поглощения от спектров возбуждения флуоресценции?
- 11 Что такое изобестическая точка? Для чего и как она используется?

Тема 5. Метод динамического светорассеяния

Примерные вопросы:

1. Какие типы электронных переходов Вы знаете? Чем они обусловлены?
2. Определите какому из растворителей (изооктану, метанолу или воде) соответствуют данные двух полос поглощения окиси мезитила. Объясните происходящие в спектре изменения.
3. Назовите интервалы поглощения УФ спектра вакуумной, видимой, ближней и дальней областей в шкале электромагнитных излучений.
4. Объясните происходящие изменения в электронном спектре поглощения п- диалкиламинобензойной кислоты при смене растворителя.
5. Какой сдвиг называется батохромным? Чем он отличается от гиперхромного эффекта? Какими причинами обусловлены эти оба эффекта?
6. Какие переходы в УФ спектре могут наблюдаться для ацетоуксусного эфира? Укажите приблизительно их положение и интенсивность. Нарисуйте приближенный УФ-спектр этого соединения.
7. Что такое: вакуум? ультрафиолет? От чего зависит интенсивность полосы поглощения? Почему полосы поглощения в УФ спектре широкие?
8. УФ-спектр снимали в воде, гексане, спирте. Определить какому растворителю принадлежат кривые сканирования 1,2, 3.

Вопросы к зачету:

1. Какова роль физических методов в химии?
2. Дайте определение прямой и обратной задачи физического метода.
3. Назовите наиболее важные характеристики спектроскопических методов исследования.
4. Раскройте сущность дифракционных методов исследования. Области применения.
5. Как можно определить характеристическое время метода?
6. Какие молекулы имеют собственный дипольный момент?
7. Что такое обертоны и составные частоты? Чем обусловлено их появление в ИК спектрах?

8. Перечислите основные области применения ИК спектроскопии, приведите примеры.
9. Какими основными свойствами характеризуются электронные состояния молекул?
10. По каким признакам можно идентифицировать в УФ спектре полосу поглощения $n \rightarrow \pi^*$ перехода? Чем объясняются сдвиги этой полосы при изменении полярности растворителя?
11. Как влияет сопряжение хромофорных групп на их электронный спектр? Как отражается на интенсивности $\pi \rightarrow \pi^*$ полосы поглощения изменение конформации сопряженной системы двойных связей?
12. Охарактеризуйте условия получения и способы изображения электронных спектров.
13. Как выражается энергия взаимодействия ядра, обладающего ненулевым спином, с внешним магнитным полем?
14. Каковы условия ядерного магнитного резонанса?
15. Что такое спин-решеточная и спин-спиновая релаксация?
16. Перечислите и запишите выражение и шкалы химических сдвигов в ЯМР.
17. Что такое константа экранирования ядра?
18. Объясните природу спин-спинового взаимодействия? Какие сведения дает величина константы спин-спинового взаимодействия?
19. Укажите основные параметры и характерные черты спектров ЯМР первого порядка.
20. Интенсивность рассеяния света.
21. Возможности метода динамического светорассеяния.
22. Что такое корреляционная функция?

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

В ИФВД РАН действует балльно-рейтинговая система оценки учебных достижений аспирантов (БАРС). Успешность изучения каждого учебного курса в течение семестра оценивается, исходя из 100 максимальных возможных баллов. По дисциплине, итоговой формой отчетности для которой является экзамен, балльная оценка распределяется на две составляющие: семестровую (текущий контроль по учебной дисциплине в течение семестра) – 50 баллов, и экзаменационную – 50 баллов. В итоге суммарный рейтинговый балл освоения учебного курса за семестр на экзамене переводится в 4-балльную оценку, которая считается итоговой по учебному курсу в течение семестра и заносится в зачетную книжку аспиранта.

Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по учебному курсу

Сумма баллов по дисциплине	Оценка по 4- балльной шкале
90-100	5 (отлично), (зачтено)
85- 89	4 (хорошо), (зачтено)
75- 84	
70-74	
65-69	3 (удовлетворительно), (зачтено)
60-64	
Ниже 60 баллов	2 (неудовлетворительно), (не зачтено)

Преподаватель, реализующий дисциплину, в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) Основная литература:

1. Бурилов В.А., Латыпова Л.З., Мостовая О.А., Якимова Л.С., Чмутова Г.А. Современные физико-химические методы исследования в органической химии - Казань, Казан. ун-т, 2017. 131 с. <http://www.ccp4.ac.uk/>
2. Дифракционный структурный анализ. Илюшин А.С., Орешко А.П. 2017 г. М.: физический факультет МГУ, Издательский дом «Крепостновъ». 616 с.
3. Спектроскопия ЯМР в органической химии, Каратаева Ф. Х.; Ключков В. В., 2016 г. <http://vina.scripps.edu>
4. Физические методы исследования в химии, Пентин Ю. А., Вилков Л. В., 2018 г.
5. Фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах /. Кулеев И. Г, Кулеев И. И., Бахарев С. М., Устинов В. В.. - Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2018. - 254 с.
6. Хельтье Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2019. — 318 с.

б) Дополнительная литература:

1. Васильева В. И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство. Москва Лань, 2019. 416 с. <http://www.ccp4.ac.uk/>
2. Бердников, Е.А.. Задачи и упражнения по ЯМР-спектроскопии в органической химии: [учеб.пособие] / Е.А. Бердников, М.А. Казымова; Казан. гос. ун-т, Хим. ин-т им. А.М. Бутлерова, Науч.-образоват. центр Казан. гос. ун-та Материалы и технологии XXI века. - Казань: [КГУ], 2017-29. Ч. 1. - 2017. - 103 с. <http://vina.scripps.edu>
3. Камалова Д. И., Салахов М. Х. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии: учебное пособие. Казань Казанский государственный университет, 2019. 167 с.
4. Морозов Александр Игоревич. Фрустрированные магнитные наноструктуры / Морозов А.И., Сигов А.С. — М.: Физматлит, 2016. — 140 с.

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения дисциплины

LAMMPS	http://lammps.sandia.gov/
QUANTUM ESPRESSO	https://www.quantum-espresso.org/
XDS	http://xds.mpimf-heidelberg.mpg.de
Autodock Vina	http://vina.scripps.edu
Pymol	https://pymol.org
Nova PX	https://www.ntmdt-si.com/
АнНа (Анализатор Наночастиц)	https://crys.ras.ru/strukturainstituta/nauchnye-podrazdeleniywotdelelektronnoj-kristallografii/laboratoriyaelektronografii

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:

При выполнении лабораторных работ используются компьютеры с характеристиками не ниже Pentium 4 - 3Гц/512Мб/80ГБ с 17-дюймовыми мониторами, объединенные в локальную сеть,

подключенную через сеть ИФВД РАН к Интернету. Для получения необходимой информации используются Web-ресурсы сети Интернет и локальная библиотека электронных материалов.

Залы, оснащенные компьютером с проектором, обычной доской - для проведения семинаров, лекционных и практических занятий.

Перечень оборудования:

1. Гидравлические прессы усилием 5000 и 10000 тонн с камерами «Тороид-10», «Тороид-15», «Тороид-35» для синтеза при высоких температурах и давлениях
2. Установка для высокотемпературной газовой экструзии при высоком газовом давлении до 0.5 ГПа
3. Установка для измерения микро-рамановских и микро-фотолюминесцентных спектров со сверхвысоким разрешением
4. Специализированный спектрометр VUKAP
5. Спектрометр высокоточный с эффективными четырьмя сцинтилляционными детекторами с кристаллом LaBr₃(Ce) с фотоэлектронными умножителями Hamamatsu R13089
6. Измерительная система физических свойств (PPMS), которая позволяет проводить измерения электросопротивления и теплоемкости веществ в области температур от 2 до 400 К
7. Инфракрасный спектрометр «BRUKER»
8. Сканирующий электронный микроскоп JEOL JSM-6390LV с энергодисперсионной приставкой для микроанализа INCA 250 (Oxford Instruments)
9. Рентгеновские дифрактометры DRON-2.0
10. Рентгеновская Гинье камера (Imaging Plate Guinier Camera G670, Huber, Germany)
11. Рентгеновский дифрактометр на базе Imaging Plate MAR345
12. 96-ядерный вычислительный кластер "Азбука"
13. Муфельная печь для спекания деталей ячеек высокого давления при температурах до 1800 °С
14. Шаровая мельница
15. Аналитические весы GR-200
16. Аналитические весы AL 304-IC
17. Функциональный генератор Tektronix AFG 3251
18. Осциллограф Agilent Technologies