

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
биологической и медицинской
физики**

Д.В. Кузьмин

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Физико-химические методы анализа
по направлению:	Биотехнология
профиль подготовки:	Биотехнология
	Физтех-школа Биологической и Медицинской Физики
	центр образовательных программ Физтех-школы биологической и медицинской физики
курс:	3
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 5 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 90 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 105 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 225, всего зач. ед.: 5

Программу составил: К.И. Котухова, специалист

Программа обсуждена на заседании центра образовательных программ Физтех-школы биологической и медицинской физики 15.06.2023

Аннотация

Курс является связующим звеном между общеинститутским и факультетским образовательными циклами, наглядно демонстрирующим возможности применения знаний из общей и теоретической физики, прикладной математики к практическим задачам исследования молекулярных систем, нано- и биотехнологии. Дисциплина включает в себя семинары и лабораторный практикум. На занятиях студенты знакомятся с масс-спектрометрией, газо-адсорбционной и жидкостной хроматографией, молекулярной спектроскопией, спектроскопией электронного и ядерного магнитного резонанса, атомно-силовой микроскопией. Проводится практическая подготовка к дальнейшей самостоятельной работе в области физики живых систем, биофизики, биоинформатики, нанотехнологии.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление обучающихся с основными принципами современных физических методов исследования молекулярных систем и их практическая подготовка к дальнейшей самостоятельной работе в области биохимии, биофизики, физики живых систем, молекулярной биологии, нанотехнологии;
- ознакомление студентов с основными физическими и физико-химическими методами количественных и качественных исследований объектов (молекулярных систем, веществ, наночастиц, поверхностей и др.)

Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования физико-химических свойств и структуры сложных веществ, в том числе смесей биологического происхождения, а также овладение основными методами физико-химических исследований молекулярных и биологических объектов;
- ознакомление студентов с принципами и подходами современных физических методов исследования молекулярных систем;
- приобретение студентами теоретических знаний, практических умений и навыков в области современных физических методов исследования молекулярных систем;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований различных систем.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен изучать, анализировать, использовать биологические объекты и процессы, основываясь на математических, физических, химических, биологических законах, закономерностях и взаимосвязях	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен составлять и оформлять научные и (или) технические (технологические, инновационные) отчеты (публикации, проекты)	ОПК-3.3 Владеет методами визуального и графического представления результатов научной (научно-технической, инновационной технологической) деятельности в виде отчетов, научных публикаций
	ОПК-3.1 Знает основные правила оформления научных публикаций и научно-технической документации, в том числе с использованием прикладного программного обеспечения

ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
ОПК-6 Способен эксплуатировать технологическое оборудование, выполнять технологические операции, управлять биотехнологическими процессами, проектировать элементы технических и технологических систем, технических объектов, технологических процессов биотехнологического производства на основе применения базовых инженерных и технологических знаний	ОПК-6.2 Способен к оценке, анализу и интерпретации полученных в результате биотехнологических процессов данных
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.5 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- базовую терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования;
- классификацию физических методов исследования;
- основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов;
- основные характеристики измеряемых величин и измерительных систем;
- численные порядки величин, характерные для различных разделов физики, химии, химической физики;
- принципы и методы построения сложных измерительных систем;
- технические основы создания измерительных систем в рамках программы дисциплины;
- методы обработки экспериментальных данных;
- основные физические методы исследования молекулярных систем, их характеристики.

уметь:

- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- использовать статистические методы расчёта термодинамических величин;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- обеспечить и оценить достоверность получаемых результатов;
- видеть в технических задачах физическое содержание;
- работать на современном, в том числе и уникальном экспериментальном оборудовании;
- планировать оптимальное проведение сложного эксперимента;
- получить наилучшие значения измеряемых величин и правильно оценить степень их достоверности;
- выяснить источники погрешностей проведённых измерений и рассчитать погрешность окончательных результатов;
- на этапе измерений, до обработки результатов измерений современными компьютерными методами, от руки быстро и грамотно построить необходимые графики, которые покажут, правильно ли работала аппаратура, разумно ли выбран диапазон измерений и т.п.;
- пользоваться справочной литературой научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- определять количественные параметры химических реакций, процессов и объектов в зависимости от заданных экспериментальных условий.

владеть:

- навыками самостоятельной работы в лаборатории на сложном экспериментальном оборудовании;
- навыками освоения большого объёма информации;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- элементарными навыками работы в современной физико-химической лаборатории;
- навыками грамотной обработки результатов опыта и сопоставления их с теоретическими и справочными данными.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Общие проблемы измерений		4	12	20
2	Оптическая спектроскопия		8	12	25
3	Радиоспектроскопия		6	12	20
4	Хроматография		6	12	20
5	Масс-спектрометрия		6	12	20
Итого часов			30	60	105
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		225 час., 5 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 5 (Осенний)

1. Общие проблемы измерений

Методы измерений: отклонений, разностный, нулевой. Стратегии измерений: когерентные и случайные выборки, мультиплексирование. Погрешности аналоговых и цифровых измерительных устройств. Систематические и случайные ошибки. Источники ошибок. Помехи, шумы. Характеристики измерительных систем: чувствительность, порог обнаружения, разрешающая способность, динамический диапазон, нелинейность, полоса пропускания. Статистические и спектральные характеристики случайных величин. Функция распределения случайной величины. Преобразование сигналов. Частотный спектр. Преобразование Фурье.

2. Оптическая спектроскопия

Поглощение света веществом. Закон Ламберта–Бугера–Бэра. Спектры поглощения, испускания и рассеяния. Радиационное время жизни и истинное время жизни возбужденного состояния. Интенсивность спектральных линий. Форма и ширина спектральной линии. Естественное, доплеровское и столкновительное уширение спектральных линий. Аппаратная ширина линии. Равновесное тепловое излучение. Источники излучения в различных спектральных диапазонах. Примеры источников равновесного и неравновесного излучения.

Приемники излучения на основе внешнего фотоэффекта. Принцип действия фотоэлектронного умножителя (ФЭУ). Приемники излучения на основе внутреннего фотоэффекта. Шумы и порог чувствительности детекторов электромагнитного излучения. Квантовый выход. Приемники излучения для различных спектральных диапазонов. Классы спектральных приборов: спектрометры, спектрографы, монохроматоры, полихроматоры. Диспергирующие элементы спектральных приборов: призма, дифракционная решетка, интерферометр. Разрешающая способность спектральных приборов.

Спектральные диапазоны и соответствующие им степени свободы в молекулярных системах. Вращательные спектры и микроволновая спектроскопия. Модель жесткого ротатора. Колебательные спектры и инфракрасная спектроскопия. Гармонический и ангармонический осцилляторы. Колебания многоатомных молекул. Колебательно-вращательные переходы в двухатомной молекуле. Электронные переходы и спектроскопия в видимом и ультрафиолетовом диапазонах. Электронно-колебательно-вращательные переходы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона. Правила отбора в электронно-колебательно-вращательных спектрах. Диссоциационный предел спектра.

Люминесценция и ее подтипы. Флуоресцентная спектроскопия. Флуоресценция и фосфоресценция. Квантовый выход флуоресценции и время жизни возбужденного состояния. Процессы тушения флуоресценции. Поляризация излучения при флуоресценции, ее применение. Безызлучательный перенос энергии и оценка расстояния между хромофорными группами.

Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Когерентное оптическое усиление в активной среде. Пороговая инверсная заселенность уровней. Устройство лазера. Газовые, твердотельные, жидкостные лазеры. Модовый состав лазерного излучения. Перестройка частоты лазерного излучения. Генерация коротких импульсов: методы модуляции добротности и самосинхронизации мод. Преимущества применения лазеров в качестве источников света в спектроскопии. Абсорбционный, внутрирезонаторный, оптико-акустический и флуоресцентный методы лазерной спектроскопии.

3. Радиоспектроскопия

Магнитные моменты электрона, ядер и атомов. ЯМР-активные ядра. Спин в постоянном магнитном поле. Магнитный момент и Ларморова прецессия. Поглощение энергии ВЧ-поля системой ядерных спинов. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг: константа экранирования, единицы измерения, эквивалентные ядра. Спин-спиновое взаимодействие, спектры первого порядка, простые правила интерпретации сверхтонкой структуры. Применение метода ЯМР для исследования структуры молекул. Обменные явления: медленный и быстрый обмен. Принципиальная схема ЯМР-спектрометра. Требования к однородности постоянного магнитного поля; способы минимизации аппаратного уширения линий. Интенсивность и ширина линий спектра ЯМР. Продольная (спин-решеточная) и поперечная (спин-спиновая) релаксация. Основы динамических методов ЯМР: 90°- и 180°-импульсы; фурье-спектроскопия ЯМР.

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Сверхтонкая структура спектра ЭПР. Структурные и динамические характеристики вещества, определяемые методами ЭПР. Принципиальная схема ЭПР-спектрометра. Особенности регистрации сигналов ЭПР: волноводы и резонаторы, низкочастотная модуляция поляризуемого магнитного поля, запись спектров в виде производной. Сопоставление частотных диапазонов ЭПР и ЯМР.

4. Хроматография

Хроматографическое разделение смеси веществ. Физическая и химическая адсорбция. Адсорбционно-десорбционное равновесие. Изотермы адсорбции. Изотермы Ленгмюра, Генри, полислойной адсорбции. Кинетика адсорбции-десорбции в потоке газа-носителя. Концепция теоретических тарелок. Закон распределения Нернста. Ширина и форма хроматографического пика. Принципиальное устройство и схема работы хроматографа. Аналитические характеристики хроматографической системы и отдельных её элементов. Набивные и капиллярные хроматографические колонки, их параметры. Оптимальные размеры и разрешение хроматографической колонки. Устройство газового хроматографа. Детекторы. Зависимость времени удерживания от температуры. Хроматография с программируемым нагревом.

Жидкостная хроматография. Градиентное элюирование. Устройство жидкостного хроматографа. Детекторы в жидкостной хроматографии.

5. Масс-спектрометрия

Метод масс-спектрометрического анализа. Единицы измерения массы, применяемые в масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Аналитические характеристики масс-спектрометра: точность измерения масс, разрешающая способность, динамический диапазон, порог детектирования, чувствительность. Методы ионизации: ионизация электронным ударом, химическая ионизация, фотоионизация, полевая ионизация, полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, матричная лазерная ионизация десорбцией (MALDI), электроспрей. Молекулярные, осколочные, квазимолекулярные ионы. Метастабильные ионы. Методы детектирования ионов. Масс-анализаторы: принципы действия, разрешающая способность. Секторный магнитный масс-анализатор, квадрупольный масс-анализатор, квадрупольные ионные ловушки, времяпролетный масс-анализатор, масс-спектрометр ионно-циклотронного резонанса с преобразованием Фурье. Решение структурных задач методами масс-спектрометрии. Тандемная масс-спектрометрия. Селекция ионов. Методы фрагментации ионов. Комбинации масс-спектрометра с жидкостным и газовым хроматографами. Применения масс-спектрометрии для решения задач биологии, химии, анализа окружающей среды, фармакологии, построения систем безопасности.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экраном.

Учебные лаборатории, оснащенные средствами измерений и вспомогательным оборудованием:

- Спектрофотометр SPECORD M400 UV-VIS.
- Оптоволоконный спектрофотометр-флуориметр AvaSpec-ULS2048CL-EVO-RS.
- ИК-Фурье-спектрометр Симекс ФТ-801.
- Экспериментальная установка для изучения комбинационного рассеяния света на основе лазерной системы LTB MNL 200 и оптоволоконного спектрометра Enspectr.
- ЯМР-релаксометр Bruker the Minispec.
- Экспериментальная установка на основе ЭПР спектрометра ВИГТ.
- Экспериментальная установка на основе масс-спектрометра (MALDI-TOF или квадрупольного MS MKS-Instruments E-Vision).
- Газовый хроматограф "Цвет-800".
- Хроматографическая система низкого давления AKTS start, GE.
- Установка "СОРБИ".
- Спектрометры динамического рассеяния света Photocorr и Photocorr Compact Z.
- Одноканальные потенциостаты-гальваностаты Elins P-30J, Elins nano.
- Атомно-силовой микроскоп NT-MDT Solver Next.
- Весы, дистиллятор, шкаф сушильный, шкаф вытяжной, водяной термостат.
- Автоматические дозаторы 10-100 мкл и 100-1000 мкл.
- Установка "Лазерный пинцет" на основе микроскопа Leica DMI8. Компактный источник излучения Leica EL6000.

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Методы исследования свойств физико-химических систем [Текст] : учеб.пособие / Е.Л. Франкевич; М-во высш. и сред.обр. РСФСР; Моск. физико-техн. ин-т (гос.ун-т). — М. : Изд-во МФТИ, 1980. — 52 с.
2. Физические методы исследования [Текст] : учеб. пособие для вузов / Е. Л. Франкевич ; М-во высш. и сред. обр. РСФСР ; Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т). — М. : Изд-во МФТИ, 1978. — 119 с.
3. Физические методы исследования [Текст] : учеб.пособие / Е.Л. Франкевич; М-во высш. и сред.обр. РСФСР; Моск. физико-техн. ин-т (гос.ун-т.). — М. : Изд-во МФТИ, 1986. — 92с.
4. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды [Текст]/А. Т. Лебедев, -М., Техносфера, 2013

Дополнительная литература

1. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст]. Ч. 1, Вводный курс / Ю. А. Устынюк - М.Техносфера,2016
2. Методы магнитного резонанса [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. В. Родин ; М-во образования и науки РФ, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т). — М. : МФТИ, 2004. — 95 с.
3. Лекции по квантовой электронике [Текст] / Н. В. Карлов. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : Наука, 1988. — 336 с.
4. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учеб. пособие для вузов / Н. Н. Кудрявцев ; М-во образования РФ, МФТИ. — М. : ВЭПИ, 1990. — 158 с.

Литература предоставляется базовой кафедрой

Рекомендованная литература для самостоятельного изучения:

- Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высшая школа, 1989. 367 с.
- Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии / пер. с англ. Е. Б. Гордона. М.: Мир, 1985. 384 с.
- Драго Р. Физические методы в химии: в 2 т.; пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова. М.: Мир, 1981 . 422 с.
- Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. М.: Техносфера, 2007.
- Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: КомКнига, 2006.
- Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.
- Звелто О. Принципы лазеров. СПб.: Издательство «Лань», 2008.
- Демтредер В. Современная лазерная спектроскопия. Долгопрудный: Интеллект, 2014.
- Лебедева В.В. Экспериментальная оптика: Оптические материалы. Источники, приемники, фильтрация оптического излучения. Спектральные приборы. Лазеры, лазерная спектроскопия М.: Изд-во МГУ, 1994. 368 с.
- Сердюк И., Заккаи Н., Заккаи Дж. Методы в молекулярной биофизике. Структура, функция, динамика: уч. пособие. В 2-х томах. Красноярск: Издательство КДУ, 2009.
- Сысоев Ф.Ф., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977.
- Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2009 . 493 с.
- Айвазов Б.В. Основы газовой хроматографии. М.: Высшая школа, 1977.
- Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
- Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. М.Мир, 1985.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Материалы к лабораторным и практическим занятиям:

<http://fizmetody.mozello.ru/>

Базы данных в свободном доступе в сети Интернет: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

При подготовке и чтении лекций может потребоваться следующее программное обеспечение:

MS Word, MS Power Point, MS Visio, MathCad. При самостоятельном изучении учебного материала необходимо наличие установленных: Acrobat Reader, DJVU Reader.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;

- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Биотехнология
профиль подготовки:	Биотехнология Физтех-школа Биологической и Медицинской Физики центр образовательных программ Физтех-школы биологической и медицинской физики
курс:	3
квалификация:	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 5 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	К.И. Котухова, специалист

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен изучать, анализировать, использовать биологические объекты и процессы, основываясь на математических, физических, химических, биологических законах, закономерностях и взаимосвязях	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен составлять и оформлять научные и (или) технические (технологические, инновационные) отчеты (публикации, проекты)	ОПК-3.3 Владеет методами визуального и графического представления результатов научной (научно-технической, инновационной технологической) деятельности в виде отчетов, научных публикаций
	ОПК-3.1 Знает основные правила оформления научных публикаций и научно-технической документации, в том числе с использованием прикладного программного обеспечения
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
ОПК-6 Способен эксплуатировать технологическое оборудование, выполнять технологические операции, управлять биотехнологическими процессами, проектировать элементы технических и технологических систем, технических объектов, технологических процессов биотехнологического производства на основе применения базовых инженерных и технологических знаний	ОПК-6.2 Способен к оценке, анализу и интерпретации полученных в результате биотехнологических процессов данных
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.5 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Физико-химические методы анализа» обучающийся должен:

знать:

- базовую терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования;
- классификацию физических методов исследования;
- основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов;
- основные характеристики измеряемых величин и измерительных систем;
- численные порядки величин, характерные для различных разделов физики, химии, химической физики;
- принципы и методы построения сложных измерительных систем;
- технические основы создания измерительных систем в рамках программы дисциплины;
- методы обработки экспериментальных данных;
- основные физические методы исследования молекулярных систем, их характеристики.

уметь:

- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- использовать статистические методы расчёта термодинамических величин;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- обеспечить и оценить достоверность получаемых результатов;
- видеть в технических задачах физическое содержание;
- работать на современном, в том числе и уникальном экспериментальном оборудовании;
- планировать оптимальное проведение сложного эксперимента;
- получить наилучшие значения измеряемых величин и правильно оценить степень их достоверности;
- выяснить источники погрешностей проведённых измерений и рассчитать погрешность окончательных результатов;
- на этапе измерений, до обработки результатов измерений современными компьютерными методами, от руки быстро и грамотно построить необходимые графики, которые покажут, правильно ли работала аппаратура, разумно ли выбран диапазон измерений и т.п.;
- пользоваться справочной литературой научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- определять количественные параметры химических реакций, процессов и объектов в зависимости от заданных экспериментальных условий.

владеть:

- навыками самостоятельной работы в лаборатории на сложном экспериментальном оборудовании;
- навыками освоения большого объёма информации;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- элементарными навыками работы в современной физико-химической лаборатории;
- навыками грамотной обработки результатов опыта и сопоставления их с теоретическими и справочными данными.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Текущий контроль состоит в защите лабораторных работ.

Порядок выполнения и защиты лабораторной работы.

Для начала выполнения лабораторной работы обучающийся в начале занятия обязан пройти процедуру допуска с обязательной проверкой теоретических основ изучаемого метода исследования и правил техники безопасности. В случае, если обучающийся не продемонстрировал необходимый минимум знаний, то он не допускается к выполнению лабораторной работы, а продолжает теоретическую подготовку к выполнению работы.

Процедура защиты лабораторных работ осуществляется в период лабораторных занятий по расписанию. В процессе защиты лабораторной работы преподаватель может задавать уточняющие вопросы из соответствующего раздела по программе курса.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Примеры вопросов к экзамену:

1. Магнитные моменты электронов и ядер. Гиромагнитное отношение для ядер и электронов. g фактор. Магнетон Бора и ядерный магнетон.
2. Спин в постоянном магнитном поле. Эффект Зеемана. Поглощение энергии электромагнитного поля системой спинов. ЭПР и ЯМР: диапазоны постоянных магнитных полей и резонансных частот.
3. Правила отбора в спектроскопии ЯМР. Константа экранирования. Химический сдвиг протонов и тяжелых ядер. Эталонные соединения.
4. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов ЯМР. Константа спин-спинового взаимодействия. Методы подавления спин-спинового взаимодействия.
5. Мультиплетность сигналов в ЯМР. Химический обмен. Вид спектра ЯМР в условиях быстрого и медленного обмена.
6. Структурные и динамические характеристики молекул, определяемые по виду спектра ЯМР.
7. Принципиальная схема ЯМР-спектрометра. Требования к напряженности и однородности постоянного магнитного поля. Способы минимизации аппаратного уширения линий.
8. Интенсивность и ширина линий в спектрах ЯМР. Понятие о продольной (спин-решеточной) и поперечной (спин-спиновой) релаксации.
9. Импульсные методы ЯМР. 90 и 180-градусные импульсы. Фурье ЯМР спектроскопия. Измерение времен продольной и поперечной релаксации.
10. Спектроскопия ЭПР. Сверхтонкая структура спектра ЭПР. Структурные и динамические характеристики вещества, определяемые методом ЭПР.
11. Принципиальная схема ЭПР-спектрометра. Особенности регистрации сигналов ЭПР: волноводы и резонаторы, низкочастотная модуляция магнитного поля и запись спектров в виде производной.
12. Поглощение и рассеяние электромагнитного излучения веществом. Закон Бугера-Ламберта-Бэра.
13. Поглощение, испускание и рассеяние электромагнитного излучения в различных спектральных диапазонах. Спектроскопия поглощения, испускания и рассеяния света.
14. Интенсивность и ширина спектральных линий. Естественное, доплеровское и столкновительное уширение спектральных линий. Аппаратная ширина линии.
15. Колебательная спектроскопия. Модели гармонического и ангармонического осциллятора. Колебания многоатомных молекул. Интерпретация колебательных спектров.
16. Колебательно-вращательные переходы в двухатомной молекуле. Правила отбора в колебательной спектроскопии, в колебательно-вращательной спектроскопии.
17. Электронные переходы. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Приближение Борна-Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона. Правила отбора в электронно-колебательно-вращательных переходах. Диссоциационный предел спектра. Определение энергии диссоциации.
18. Физическая и химическая адсорбция. Адсорбционно-десорбционное равновесие. Изотермы адсорбции. Изотермы Ленгмюра, Генри, полислоистой адсорбции.
19. Кинетика адсорбции-десорбции в потоке газа-носителя. Концепция теоретических тарелок. Закон распределения Нернста. Ширина и форма хроматографического пика. Разрешающая способность хроматографической колонки.
20. Оптимальные размеры и разрешение хроматографической колонки. Зависимость времени удерживания молекулы в хроматографической колонке от температуры. Хроматография с программируемым нагревом.
21. Принципиальное устройство и принцип работы газового хроматографа. Набивные и капиллярные хроматографические колонки, их параметры. Детекторы.
22. Жидкостная хроматография. Градиентное элюирование. Устройство жидкостного хроматографа. Детекторы в жидкостной хроматографии.
23. Метод масс-спектрометрического анализа. Единицы измерения массы: а.е.м., Дальтон, Томсон. Блок-схема масс-спектрометра. Масс-спектр. Аналитические характеристики масс-спектрометра: точность измерения масс, разрешающая способность, динамический диапазон, порог детектирования, чувствительность.

24. Методы ионизации: ионизация электронным ударом, химическая ионизация, фотоионизация, полевая ионизация, полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, матричная лазерная ионизация десорбцией (MALDI), электроспрей. Молекулярные, осколочные, квазимолекулярные ионы. Метастабильные ионы.
25. Физические принципы деструктивного и недеструктивного детектирования ионов. Устройства для детектирования ионов: коллекторный детектор, коллекторный детектор с антидинаatronным электродом, цилиндр Фарадея, вторичный электронный умножитель, микроканальная пластина.
26. Квадрупольный масс-анализатор, времяпролетный масс-анализатор.

Пример экзаменационного билета:

1. Структурные и динамические характеристики молекул, определяемые по виду спектра ЯМР. Принципиальная схема ЯМР-спектрометра. Требования к напряженности и однородности постоянного магнитного поля. Способы минимизации аппаратурного уширения линий.
2. Метод масс-спектрометрического анализа. Единицы измерения массы, применяемые в масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Аналитические характеристики масс-спектрометра: точность измерения масс, разрешающая способность, динамический диапазон, порог детектирования, чувствительность.
3. В масс-сепараторе, представляющим собой масс-спектрометр с секторным магнитным полем производится разделение изотопов $^{235}\text{U}^+ / ^{238}\text{U}^+$. Ускоряющая разность потенциалов равна 10 кВ. Магнитное поле в масс-сепараторе равно 1 кГс. В область ионного источника производится напуск из балластного объема, давление в котором равно $P_0 = 10^{-3}$ Торр. Какая должна быть объемная скорость откачки у насоса, откачивающего вакуумную камеру масс-анализатора, если он подключен к вакуумной камере через трубопровод, диаметр которого равен 10 см, длина – 60 см. Проводимость всей системы, через которую происходит натекание газа в вакуумную камеру, можно считать равной $G = 9,4 \times 10^{-2}$ л/сек.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

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

Экзамен проходит в традиционной форме беседы преподавателя со студентом по теме экзаменационного билета. Экзаменационный билет содержит два теоретических вопроса из программы курса и одну задачу. Для подготовки к устному ответу обучающемуся отводится от 40 до 60 минут. Во время подготовки к ответу студенту запрещено чем-либо пользоваться кроме письменных принадлежностей. Использование электронных устройств (в том числе средств сотовой радиосвязи) не допускается. В процессе ответа по билету экзаменатор может задавать уточняющие вопросы. После ответа по билету экзаменатор вправе задавать студенту любые дополнительные вопросы по программе курса. В совокупности опрос обучающегося на устном экзамене не должен превышать двух астрономических часов. К сдаче экзамена допускаются только обучающиеся, успешно выполнившие и защитившие все предусмотренные программой лабораторные работы.