

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

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе

А.А. Воронов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Практикум по физическим методам исследования веществ и материалов
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физической химии
курс:	3
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 6 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 120 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Программу составили:

И.А. Попов, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент

Е.Н. Кукаев, канд. физ.-мат. наук, доцент

А.Ю. Куксин, канд. физ.-мат. наук, доцент

А.В. Максимычев, д-р физ.-мат. наук, профессор

В.В. Бревнов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физической химии 04.06.2020

Аннотация

Курс наглядно демонстрирует возможности применения знаний из общей и теоретической физики, прикладной математики к практическим задачам исследования молекулярных систем, нано- и биотехнологии. Дисциплина включает в себя лабораторный практикум. На занятиях студенты знакомятся с молекулярной спектроскопией (колебательно-вращательной и электронной), лазерной спектроскопией, методами диагностики низкотемпературной плазмы, спектроскопией электронного и ядерного магнитного резонанса. Проводится практическая подготовка к дальнейшей самостоятельной работе в области энергетики, физики плазмы, материаловедении, технологии наноматериалов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление студентов с основными физическими и физико-химическими методами количественных и качественных исследований объектов (веществ, молекулярных систем, материалов, сред, плазмы и др.).

Задачи дисциплины

- ознакомление студентов с принципами и подходами современных физических методов исследования молекулярных систем;
- приобретение студентами теоретических знаний, и 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 применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
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

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- 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;
- понятия шум, помеха, погрешность измерения, виды шумов и погрешностей, стратегии измерения;
- различные физические распределения;
- технические основы создания измерительных систем;
- методы обработки экспериментальных данных;
- методы исследования равновесных и неравновесных систем;
- основные физические методы исследования молекулярных систем, их характеристики;
- основные аналитические характеристики измерительных систем.

уметь:

- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- 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;
- выяснять 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..

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 табличными данными.
- основными статистическими методами определения термодинамических величин различных систем для решения задач макроскопической физики ;
- методами составления и решения кинетических уравнений для реагирующих систем.

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	Основы техники безопасности в лаборатории. Общие вопросы проведения и обработки лабораторных работ, погрешности измерений			4	4
2	Измерение колебательной и вращательной температур в газовом разряде на по спектру испускания молекулы азота			11	24
3	Исследование электронно-колебального спектра поглощения молекулы I ₂			12	23
4	Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул			11	23
5	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса: исследование иона Mn ²⁺			11	23
6	Исследование релаксационных процессов с помощью ЯМР низкого разрешения			11	23
Итого часов				60	120

Подготовка к экзамену	0 час.
Общая трудоёмкость	180 час., 4 зач.ед.

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

Семестр: 6 (Весенний)

1. Основы техники безопасности в лаборатории. Общие вопросы проведения и обработки лабораторных работ, погрешности измерений

Основы техники безопасности в лаборатории.

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. Измерение колебательной и вращательной температур в газовом разряде на по спектру испускания молекулы азота

Работа посвящена ознакомлению со спектральными методами измерения поступательной, электронной, колебательной и вращательной температур в газоразрядной плазме и приобретения практических навыков работы со спектральными приборами.

3. Исследование электронно-колебального спектра поглощения молекулы I₂

Работа посвящена изучению основ абсорбционной молекулярной спектроскопии в видимом диапазоне на примере спектра поглощения двухатомной молекулы йода. Студенты приобретают навыки работы на автоматическом спектрофотометре, изучая структуру электронно-колебательно-вращательного спектра поглощения двухатомных молекул, определяют основные молекулярные постоянные с использованием статистических методов обработки результатов эксперимента на ЭВМ.

4. Инфракрасная спектроскопия поглощения. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул

Инфракрасная (ИК) спектроскопия используется в различных областях науки как мощный и универсальный физический метод исследования строения вещества и механизмов физико-химических процессов. Этот метод особенно удобен для решения задач определения структуры сложных органических молекул, таких как, например, полимеры и биомолекулы. Широко применяется ИК спектроскопия для качественного и количественного анализа в химии и экологических приложениях, для исследования механизма и кинетики сложных химических реакций. Классическим применением ИК спектроскопии (как и спектроскопии видимого и УФ диапазонов) является определение структуры энергетических уровней молекул и связанных с этой структурой молекулярных постоянных. Эти данные используются для расчетов термодинамических функций веществ и констант равновесия химических реакций.

В данной работе по результатам измерения положения линий вращательной структуры колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы определяются вращательные постоянные для основного и первого колебательных уровней основного электронного состояния, постоянная центробежного растяжения и величина колебательного кванта.

5. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса: исследование иона Mn²⁺

Целями данной лабораторной работы являются: исследование сверхтонкой структуры спектров электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), измерение скорости спин-спинового обмена в растворах и кристаллах, исследование влияния амплитуды высокочастотной модуляции и уровня диэлектрических потерь на вид спектров ЭПР.

6. Исследование релаксационных процессов с помощью ЯМР низкого разрешения

Данная работа выполняется на ЯМР-релаксометре Bruker minispec. Целью работы является изучение механизмов релаксации ядерной намагниченности и освоение методов измерения времен продольной и поперечной релаксации протонов. Для измерения времен релаксации протонной намагниченности используется вода и водные растворы сульфатов (CuSO_4 , MnSO_4 , Na_2SO_4).

Измерение скоростей релаксации ядерной намагниченности используется для исследования динамики различных молекулярных процессов, таких как химический обмен, самодиффузия и др. Среди областей практического применения ЯМР-релаксометрии можно выделить изучение пористых сред в нефтяной промышленности, анализ содержания твердых жиров и масличности семян, проверку контрастирующих агентов для МРТ, изучение физических и химических свойств полимеров (плотность и степень кристалличности, степень полимеризации, доля пластификаторов и доба-вок и др.).

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

Учебные лаборатории, оснащенные средствами измерений и вспомогательным оборудованием:

- Спектрофотометр SPECORD UV-VIS, термостат
- Оптоволоконный спектрометр-флуориметр AvaSpec-ULS2048CL-EVO-RS
- ИК-Фурье-спектрометр Симекс ФТ-801
- Экспериментальная установка на основе ЭПР спектрометра ВИГТ
- ЯМР-релаксометр Bruker the Minispec.
- Экспериментальная установка, включающая газоразрядную трубку, насос 2НВР-5ДМ, вольтметр, манометр, систему питания разряда, систему охлаждения, монохроматор с системой управления
- Экспериментальная установка на основе масс-спектрометра MKS-Instruments E-Vision
- Атомно-силовой микроскоп NT-MDT
- Газовый хроматограф "Цвет-800"
- Установка «СОРБИ»
- Весы, дистиллятор, шкаф сушильный, шкаф вытяжной.

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. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст]. Ч. 1, Вводный курс / Ю. А. Устынюк - М. Техносфера, 2016

Дополнительная литература

1. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учеб. пособие для вузов / Н. Н. Кудрявцев ; М-во образования РФ, МФТИ. — М. : ВЭПИ, 1990. — 158 с.
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. Физика газового разряда [Текст] : [учеб. пособие для вузов] / Ю. П. Райзер .— 3-е изд., перераб. и доп. — Долгопрудный : Интеллект, 2009 .— 736 с.
4. Лекции по квантовой электронике [Текст] / Н. В. Карлов .— 2-е изд., испр. и доп. — М. : Наука, 1988 .— 336 с.
5. Методы исследований в экспериментальной физике [Текст] : учеб. пособие для вузов / М. И. Пергамент .— М. : Интеллект, 2010 .— 304 с.
6. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды [Текст]/А. Т. Лебедев , -М., Техносфера, 2013

Рекомендованная литература для самостоятельного изучения:

- 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.
- Звелто О. Принципы лазеров. СПб.: Издательство «Лань», 2008.
- Демтредер В. Современная лазерная спектроскопия. Долгопрудный: Интеллект, 2014.
- 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.
- Лебедева В.В. Экспериментальная оптика: Оптические материалы. Источники, приемники, фильтрация оптического излучения. Спектральные приборы. Лазеры, лазерная спектроскопия М.: Изд-во МГУ, 1994. 368 с.
- Курбатов Л.Н. Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра. М.: Физматкнига, 2013. 400 с.
- Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. М.Мир,1985.
- Айвазов Б.В. Основы газовой хроматографии. М.: Высшая школа,1977.
- Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.

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

База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. - <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.

Материалы к лекциям и семинарским занятиям <http://mipt.ru/dmcp/student/files/fizmetody/>.

Материалы к лекциям и семинарским занятиям <http://fizmetody.mozello.ru/>.

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 выполнении лабораторных работ может потребоваться следующее программное обеспечение: MS Word, MS Power Point, MS Visio, MathCad, Origin, Mathlab. 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;
- напряжённой 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.

Для самостоятельной работы обучающимся рекомендуется для изучения следующая литература:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М., Мир, 2003.
2. Клаассен К.Б. Основы измерений. Электронные методы и приборы в измерительной технике. М.: Постмаркет, 2000.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: КомКнига, 2006.
4. Чижик В.И. Ядерная магнитная релаксация. СПб.: Изд. С.-Петербургского университета, 2004.
5. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир, 1985.
6. Сердюк И., Заккаи Н., Заккаи Дж. Методы в молекулярной биофизике. Структура, функция, динамика (комплект из 2 книг) КДУ, 2009.
7. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды. Техносфера, 2013.
8. Устынюк Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс). Техносфера, 2016.
9. Конюхов В.Ю. Хроматография Лань, 2016.

Для самостоятельной работы обучающимся рекомендуется для изучения следующая дополнительная литература по разделам:

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ ПРОЦЕССА ИЗМЕРЕНИЙ

1. Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. М.: Мир, 1985.
2. Макс Ж. Методы и техника обработки сигналов при физических измерениях. Т. 1. М.: Мир, 1983.
3. Отто М. Современные методы аналитической химии. Т. 1, 2. М.: Техносфера, 2004.

ПЕРЕДАЧА СИГНАЛОВ ПО ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ЦЕПЯМ

1. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники. Т. 1. М.: Мир, 1993.
2. Харкевич А.А. Теоретические основы радиосвязи. М.: ГИТТЛ, 1957.
3. Дубнищев Ю.Н. Колебания и волны. Новосибирск: Сибирское университетское издательство, 2004.

ИЗМЕРЕНИЕ ДАВЛЕНИЯ

1. Грошковский Я. Техника высокого вакуума. М.: Мир, 1975.
2. Пипко А.И., Плисковский В.Я. Основы вакуумной техники. М.: Энергоатом-издат, 1992.
3. Розанов Л.Н. Вакуумная техника. М.: Высшая школа, 1990.
4. Семененко К.Н. Проблемы и перспективы современной химии высоких давлений. СОЖ, 2000, №5, с.58-64.

ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ

1. Гордов А.Н., Жагулло О.М., Иванова А.Г. Основы температурных измерений. М.: Энергоатомиздат, 1992.
2. Смирнов Б.М. Введение в физику плазмы. М.: Наука, 1982.
3. Методы исследования плазмы. Спектроскопия, лазеры, зонды / под ред. В. Лохте-Хольгрёвен. М.: Мир, 1971.
4. Кинджери В. Измерения при высоких температурах. М.: Metallurgizdat, 1963.

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

1. Сысоев Ф.Ф., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977.
2. Бернард Дж. Современная масс-спектропия. М.: ИЛ, 1957.

ХРОМАТОГРАФИЯ

1. Лейбниц Э., Штруппе Х.Г. Руководство по газовой хроматографии. Т. 1, 2. М.: Мир, 1988.
2. Айвазов Б.В. Основы газовой хроматографии. М.: Высшая школа, 1977.
3. Жуховицкий О.А. Основы жидкостной хроматографии. М.: Мир, 1973.

МАГНИТНАЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЯ

1. Маклочан К.А. Магнитный резонанс. М.: Химия, 1976.
2. Фаррар Т., Беккер Э. Импульсная и фурье-спектропия ЯМР. М.: Мир, 1973.
3. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1967.
4. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М.: Мир, 1975.
5. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984.
6. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М.: МБФНП, 2011.

ОПТИЧЕСКАЯ (В ТОМ ЧИСЛЕ ЛАЗЕРНАЯ) СПЕКТРОСКОПИЯ

1. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.
2. Квантовая электроника. Маленькая энциклопедия. М.: Советская энциклопедия, 1969.
3. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. М.: Техносфера, 2007.
4. Звелто О. Принципы лазеров. 4-е изд. СПб.: Издательство «Лань», 2008.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физической химии
курс:	<u>3</u>
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 6 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

И.А. Попов, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент
Е.Н. Кукаев, канд. физ.-мат. наук, доцент
А.Ю. Куксин, канд. физ.-мат. наук, доцент
А.В. Максимычев, д-р физ.-мат. наук, профессор
В.В. Бревнов, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
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

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Практикум по физическим методам исследования веществ и материалов» обучающийся должен:

знать:

- 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;
- понятия шум, помеха, погрешность измерения, виды шумов и погрешностей, стратегии измерения;
- различные физические распределения;
- технические основы создания измерительных систем;
- методы обработки экспериментальных данных;
- методы исследования равновесных и неравновесных систем;
- основные физические методы исследования молекулярных систем, их характеристики;
- основные аналитические характеристики измерительных систем.

уметь:

- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- 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;
- выяснять 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..

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 табличными данными.
- основными статистическими методами определения термодинамических величин различных систем для решения задач макроскопической физики ;
- методами составления и решения кинетических уравнений для реагирующих систем.

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

Текущий контроль состоит в выполнении и защите лабораторных работ, коллоквиуме.

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.

Примеры вопросов для сдачи лабораторных работ.

ЯМР и ЭПР.

Достаточно ли для наблюдения ЯМР (ЭПР) совпадения частоты переменного поля и величины ? Почему для стимулирования переходов вектор переменного магнитного поля должен быть перпендикулярен ?

Как следовало бы изменить условия проведения эксперимента, если интенсивность сигналов в спектре ЯМР (ЭПР) недостаточна? Какие условия эксперимента следует изменять для повышения разрешения спектров ЯМР (ЭПР)?

Как величина химического сдвига в ЯМР связана с локальным магнитным полем? В чем преимущества использования безразмерной величины химического сдвига? Какие физико-химические факторы влияют на величину химического сдвига?

Чем объясняется сильный «слабополюсный» сдвиг сигналов ПМР в молекуле бензола?

Что такое константа спин-спинового взаимодействия и как определить ее из спектра ЯМР? Будут ли различаться КССВ при расщеплении линий CH₂ и CH₃ групп в фрагменте CH₂-CH₃?

Какие параметры анализируют в спектрах ЯМР высокого разрешения и какую информацию дает этот анализ? Для чего в спектроскопии ЯМР используют вещества-стандарты? В чем достоинства и недостатки ТМС как стандарта для ЯМР?

Какие факторы определяют ширину линий в спектрах ЯМР (или ЭПР)?

Объяснить физическую суть обменного уширения и сужения линий ЯМР. Почему воду неудобно использовать в качестве эталона в ЯМР?

Какие процессы характеризуют времена продольной и поперечной релаксации? Почему в общем случае они отличаются друг от друга?

При рассмотрении обменных процессов выделяют ситуации медленного, промежуточного и быстрого обмена. Как изменяется при этом вид спектра? Какая величина является мерой сравнения?

Почему времена продольной и поперечной ЯМР-релаксации для воды совпадают?

Почему в зависимости времени продольной релаксации от времени корреляции наблюдается минимум, а для времени поперечной релаксации минимума нет?

Какое время релаксации больше, T₁ или T₂, почему?

Отличаются ли времена релаксации для ЯМР и ЭПР?

Какими процессами обусловлено характерное время спада сигнала свободной прецессии после окончания возбуждающего ее импульса?

Каковую последовательность импульсов используют для наблюдения спинового эхо? Как изменяется намагниченность образца в процессе этих измерений?

Объясните, почему сульфаты меди и марганца сильнее влияют на времена продольной и поперечной релаксации, чем сульфат натрия.

Нарисуйте схему ЯМР-спектрометра или импульсного ЯМР-релаксометра и объясните принцип его работы.

Как изменится ширина линий в спектре ЯМР при кристаллизации воды? Приведите численную оценку, сравните с шириной линий ЯМР в жидкости.

Изобразите принципиальную схему ЭПР спектрометра. Как следует располагать образец в СВЧ резонаторе для оптимального наблюдения сигнала ЭПР?

При регистрации спектров ЭПР зачастую проводят амплитудную модуляцию постоянного магнитного поля. Как это влияет на вид сигналов ЭПР? С какой целью производится модуляция? Какими факторами определяется ширина линий в спектрах ЭПР? Какая информация Вам понадобится, чтобы провести соответствующие оценки?

Хорошо известно, что линии ЯМР в твердых телах обычно очень широкие, а ЯМР высокого разрешения – это ЯМР жидкостей. Почему, в отличие от ЯМР, линии ЭПР в твердых телах зачастую уже, чем в растворах? (Например, для парамагнитных примесей в диамагнитных кристаллах, для кристаллов стабильных радикалов.)

Существуют три изомерные формы соединения диметилбензол. Анион-радикал какого из изомеров будет иметь наименьшее число линий СТС в спектре ЭПР?

Постройте ЭПР-спектр анион-радикала пара-динитробензола (ядро азота имеет спин $I = 1$). Константы СТВ для ядер азота и протонов равны соответственно $a(N) = 0,148$ мТ и $a(H) = 0,112$ мТ.

Нарисуйте схематически ЭПР-спектр радикала CHD₂.

ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Каковы основные типы спектральных приборов и их характеристики?

Изобразите принципиальную схему ИК-Фурье-спектрометра. Опишите, каким образом получают с его помощью спектр поглощения какого-либо вещества.

От чего зависит разрешение спектральных линий, получаемых при использовании ИК-Фурье-спектрометра?

Что такое аподизация? Для чего применяется эта процедура?

Каковы преимущества Фурье-спектрометров перед приборами с диспергирующими элементами?

Приведите вид интерферограммы, получаемой с помощью ИК-Фурье-спектрометра, для излучения монохроматического источника и излучения абсолютно черного тела.

Как повлияет на качество интерферограммы, получаемой с помощью ИК-Фурье-спектрометра, неравное разделение интенсивности источника по пучкам (отличие от 50 % коэффициента пропускания светоделителя)?

Каков порядок величин электронной, колебательной и вращательной энергий (на примере какой-либо двухатомной молекулы)?

Оцените величину расщепления в колебательно-вращательном спектре HCl, обусловленную тем, что Cl встречается в виде двух изотопов в соотношении 3:1. Считать, что квант колебания $\omega_e \approx 3000$ см⁻¹, а вращательная постоянная $B \approx 10.6$ см⁻¹.

Объясните немонотонность распределения интенсивностей линий вращательной структуры колебательно-вращательного спектра в зависимости от вращательного числа j .

Сформулируйте правила отбора в молекулярных спектрах (для двухатомных молекул).

Предложите, с помощью каких методов молекулярной спектроскопии можно определить частоту колебаний и вращательную постоянную молекул HCl и Cl₂.

Опишите колебательную структуру электронных спектров молекул. Сформулируйте принцип Франка-Кондона.

Вращательная структура электронных и колебательных спектров. Поясните причины образования кантов полос в электронных спектрах.

Предложите способы экспериментального определения вращательных постоянных двухатомных молекул и энергии диссоциации для гомо- и гетероядерных молекул.

От чего зависит интенсивность линий поглощения в чисто колебательной, вращательной и электронно-колебательно-вращательной спектроскопии?

Чем определяется ширина линий в спектре поглощения?

На примере какого-либо спектра поясните, как будет менять его вид с ростом температуры исследуемого объекта.

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

Примеры вопросов коллоквиума.

Что такое дисперсия и математическое ожидание случайной величины?

Равновесные и неравновесные шумы.

Как продольная диффузия влияет на разрешающую способность хроматографа?

Как зависит высота эквивалентной теоретической тарелки от температуры?

Принцип работы времяпролетного масс-анализатора.

Способы детектирования ионов в масс-спектрометрах.

Ионизация электронным ударом, химическая ионизация.

Объясните принцип работы ионного источника MALDI.

При каком давлении работает электроспрей?

Предложите способ атмосферного ввода ионов в масс-спектрометр.

Опишите колебательную структуру электронных спектров молекул. Сформулируйте принцип Франка-Кондона.

Вращательная структура электронных и колебательных спектров. Поясните причины образования кантов полос в электронных спектрах.

Предложите способы экспериментального определения вращательных постоянных двухатомных молекул и энергии диссоциации для гомо- и гетероядерных молекул.

От чего зависит интенсивность линий поглощения в чисто колебательной, вращательной и электронно-колебательно-вращательной спектроскопии?

Чем определяется ширина линий в спектре поглощения?

Критерии оценивания

Оценка «отлично (10)» выставляется студенту, показавшему всесторонние систематизированные глубокие знания в рамках программы курса и за её пределами, умение решать задачи по физическим методам исследования, умение уверенно делать обоснованный выбор в пользу определенного и/или комбинированного метода исследования при решении сложной нестандартной задачи с проведением всех необходимых оценок.

Оценка «отлично (9)» выставляется студенту, показавшему всесторонние систематизированные глубокие знания в рамках программы курса, умение решать задачи по физическим методам исследования, умение делать обоснованный выбор в пользу определенного и/или комбинированного метода исследования при решении нестандартной задачи с проведением всех необходимых оценок.

Оценка «отлично (8)» выставляется студенту, показавшему всесторонние систематизированные глубокие в рамках программы курса, умение решать задачи по физическим методам исследования, умение делать выбор в пользу определенного метода исследования с проведением все необходимых оценок, однако при решении нестандартных задач допустившему некоторые несущественные неточности.

Оценка «хорошо (7)» выставляется студенту, если он продемонстрировал твердое знание и уверенное понимание материала учебной программы и умение свободно применять теоретические основы физических методов исследования на практике при решении типовых задач, однако при решении нестандартных задач допустил некоторые неточности.

Оценка «хорошо (6)» выставляется студенту, если он продемонстрировал твердое знание материала учебной программы и умение применять теоретические основы физических методов исследования на практике при решении типовых задач.

Оценка «хорошо (5)» выставляется студенту, если он продемонстрировал твердое знание материала учебной программы и умение применять теоретические основы физических методов исследования на практике при решении типовых задач, однако допустил при ответе ряд несущественных неточностей.

Оценка «удовлетворительно (4)» выставляется студенту, показавшему владение основными знаниями, необходимыми для правильного подхода к решению типовых задач в объеме программы и продемонстрировавшему общее понимание теоретических основ физических методов исследования, однако демонстрируемые знания имеют разрозненный характер, что не препятствует дальнейшему обучению.

Оценка «удовлетворительно (3)» выставляется студенту, показавшему владение основными знаниями, необходимыми для правильного подхода к решению типовых задач в объеме программы и продемонстрировавшему общее понимание теоретических основ физических методов исследования, однако демонстрируемые знания могут содержать некоторые пробелы и иметь несистемный разрозненный характер, что не препятствует дальнейшему обучению.

Оценки «неудовлетворительно (2)» или «неудовлетворительно (1)» выставляется студенту, если у него отсутствуют знания базовой составляющей дисциплины, либо допускаются грубые ошибки в изложении материала, либо отсутствует владение терминологией, отсутствует умение находить правильные подходы к решению типовых задач в объеме программы курса. 5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

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

Дифференцированный зачет выставляется на основе усреднения оценок за лабораторные работы, коллоквиум.