

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине:	Современные методы исследования элементарного химического акта, 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 химической физики
курс:	4
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составили:

Н.Л. Стародубцева, канд. биол. наук

В.А. Надточенко, д-р хим. наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики 29.05.2020

Аннотация

Курс "Современные методы исследования элементарного химического акта, веществ и материалов" предусматривает изучение новых физико-химических методов при исследовании механизмов химических и биохимических реакций, изучении веществ и материалов.

Задачи курса:

- освоение студентами физических основ оптических и микроскопических методов исследований;
- приобретение базовых знаний о современных подходах на основе оптических методов идентификации структуры веществ, материалов, биоорганических соединений и их качественному и количественному анализу;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области оптической спектроскопии.

По результатам освоения курса студент будет:

Знать:

- основы оптических методов детектирования;
- основы абсорбционной спектроскопии;
- основы спектроскопии комбинационного рассеяния;
- основы оптической микроскопии.

Уметь:

- применять полученные знания для выбора соответствующего оптического метода;
- производить обработку результатов исследований оптических и микроскопических исследований;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

Владеть:

- теоретическими представлениями об оптических методах исследований;
- методикой выбора и оценки применимости метода для исследования вещества, материала;
- культурой постановки и моделирования экспериментальной задачи по тематике курса;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами веществ, материалов, биомacro-молекул.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Введение. Методологические основы оптических методов детектирования
2. Абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области
3. Спектры поглощения макромолекул
4. Абсорбционная спектроскопия в ИК-области
5. Анализ инфракрасных спектров макромолекул
6. Классическая (нерезонансная) спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская)
7. Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния. Колебательная рамановская оптическая активность
8. Оптическая активность
9. Классическая световая микроскопия в рамках геометрической оптики
10. Конфокальная микроскопия. Безлинзовая микроскопия
11. Классическая флуоресцентная микроскопия
12. Флуоресцентная микроскопия вне дифракционного барьера
13. Флуоресцентно-резонансный перенос энергии
14. Флуоресцентная спектроскопия одиночных молекул

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изучение новых физико-химических методов при исследовании механизмов химических и биохимических реакций, изучении веществ и материалов.

Задачи дисциплины

- освоение студентами физических основ оптических и микроскопических методов исследований;
- приобретение базовых знаний о современных подходах на основе оптических методов идентификации структуры веществ, материалов, биоорганических соединений и их качественному и количественному анализу;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области оптической спектроскопии.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.9 Знает перечень ведущих периодических научных изданий и способен выделять актуальные научные публикации в профессиональной области
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.7 Способен оценивать требуемые ресурсы (материальные и временные) для планирования и проведения научного эксперимента
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основы оптических методов детектирования;
- основы абсорбционной спектроскопии;
- основы спектроскопии комбинационного рассеяния;
- основы оптической микроскопии.

уметь:

- применять полученные знания для выбора соответствующего оптического метода;
- производить обработку результатов исследований оптических и микроскопических исследований;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

- теоретическими представлениями об оптических методах исследований;
- методикой выбора и оценки применимости метода для исследования вещества, материала;
- культурой постановки и моделирования экспериментальной задачи по тематике курса;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами веществ, материалов, биомакромолекул.

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	Введение. Методологические основы оптических методов детектирования	2	2		2
2	Абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области	2	2		2
3	Спектры поглощения макромолекул	2	2		2
4	Абсорбционная спектроскопия в ИК-области	2	2		2
5	Анализ инфракрасных спектров макромолекул	2	2		2
6	Классическая (нерезонансная) спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская)	2	2		2
7	Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния.	2	2		2
8	Оптическая активность	2	2		2
9	Классическая световая микроскопия в рамках геометрической оптик	2	2		2
10	Конфокальная микроскопия. Безлинзовая микроскопия	2	2		2
11	Классическая флуоресцентная микроскопия	2	2		2
12	Флуоресцентная микроскопия вне дифракционного барьера	2	2		2
13	Флуоресцентно-резонансный перенос энергии	4	4		4
14	Флуоресцентная спектроскопия одиночных молекул	2	2		2
Итого часов		30	30		30
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

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

Семестр: 8 (Весенний)

1. Введение. Методологические основы оптических методов детектирования

Исторический обзор, анализ эволюции представлений о веществе, историческая шкала развития методов разделения и исследования макромолекул, введение в методологию биологического исследования, представление о спектре современных методов физико-химического анализа макромолекул, обсуждение критериев применимости методов и обработки полученных результатов, биоинформационные методы. Особенности выделения макромолекул разных классов из сложных смесей.

2. Абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области

Теоретическое введение в абсорбционную спектроскопию (коэффициент экстинкции, спектральный диапазон). Спектрофотометры для измерений в УФ и видимой области.

Общие закономерности поглощения макромолекул в УФ-диапазоне. Спектральные параметры мономерных звеньев полимеров и тонкая структура спектра. Изменение спектров аминокислот под влиянием внешних факторов (рН среды, протонирование ионогенных групп). Определение концентрации макромолекул по спектрам поглощения.

3. Спектры поглощения макромолекул

Ультрафиолетовые спектры поглощения белков. Особенности структуры спектров белков по сравнению со спектрами смеси ароматических аминокислот, входящих в их состав. Методы расчета вклада светорассеяния в измеряемое поглощение. Оценка вклада мономерных звеньев, доступных внешнему воздействию, методом дифференциальной спектрофотометрии.

УФ поглощение нуклеиновых кислот, хромофоры. Расчет гиперхромного эффекта при переходе от двухспиральных структур ДНК к односпиральной. Вклад взаимодействия оснований в гиперхромный эффект. Тепловая денатурация и ренатурация ДНК. Кривые плавления ДНК.

4. Абсорбционная спектроскопия в ИК-области

Линейная ИК-спектроскопия и ее применение в исследовании макромолекул (определение вторичной структуры).

Спектрометры ИК диапазона. Дисперсионные спектрометры ближнего ИК диапазона. Спектрометры среднего и дальнего ИК диапазона с Фурье-преобразованием. Поглощение в тонких слоях, использование тяжелой воды, D₂O.

Квантово-механическое описание колебаний. Колебательные моды многоатомных макромолекул, амидные полосы белков.

5. Анализ инфракрасных спектров макромолекул

Метод разложения инфракрасных спектров на компоненты. Определение вторичной структуры макромолекул (белки, синтетические полимеры, ДНК).

Дифференциальная ИК-спектроскопия. Инфракрасная спектроскопия, разрешенная во времени.

6. Классическая (нерезонансная) спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская)

Спектры комбинационного рассеяния и ИК поглощения. Рамановские спектрометры и микроскопы. Определение вторичной структуры макромолекул. Конформационная динамика в растворе и кристалле.

7. Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния.

Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния. Колебательная рамановская оптическая активность.

8. Оптическая активность

Круговой дихроизм. Теоретические основы. Спектрометры КД. Использование метода КД в биохимических исследованиях. КД спектры белков (определение вторичной структуры, мембранные белки, сворачивание белка). КД спектры РНК, ДНК и комплексов ДНК с белками. КД спектры углеводов. Круговой дихроизм в далеком УФ (190-160 нм) с использованием синхротронного излучения. Глобулярные белки.

9. Классическая световая микроскопия в рамках геометрической оптики

Оптические методы визуализации внутренней структуры и микрорельефа поверхности объектов, представления об области применения и ограничениях, накладываемых физическими принципами функционирования на пространственное и временное разрешение рассматриваемых методов.

Основные положения геометрической оптики. Стандартный световой микроскоп. Дифракционное ограничение разрешающей способности. Проблема контраста. Микроскопия темного поля. Фазово-контрастная микроскопия. Поляризационный микроскоп.

10. Конфокальная микроскопия. Безлинзовая микроскопия

Конфокальная микроскопия. Субволновое разрешение в рамках геометрической оптики. Сканирующая микроскопия ближнего поля.

11. Классическая флуоресцентная микроскопия

Механизм флуоресценции. Диаграмма Яблонского. Схема эпифлуоресцентного микроскопа. Одно- и двухфотонное возбуждение. Аппаратура для измерения спектров флуоресценции при комнатной и низкой (770K) температурах. Сопоставление спектров флуоресценции пигментов в растворе и в клетке. Тушение флуоресценции.

12. Флуоресцентная микроскопия вне дифракционного барьера

4Pi-конфокальная микроскопия, двухимпульсная стимулированная микроскопия, флуоресцентная микроскопия в стоячих волнах.

13. Флуоресцентно-резонансный перенос энергии

Фёрстеровский перенос энергии, диполь-дипольный перенос энергии; флуоресцентный резонансный перенос энергии; индуктивно-резонансный перенос энергии.

14. Флуоресцентная спектроскопия одиночных молекул

От ансамбля к одной молекуле. Лазер-индуцируемая флуоресценция. Схемы мечения макромолекул.

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

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Lakowitz J. R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. 3 ed. Singapore: Springer Science + Business Media. 2006.
2. Лакович Д. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир. 1986.
3. Fedorova O. A., Chernikova E. Y., Fedorov Y. V., Gulakova E. N., Peregudov A. S., Lyssenko K. A., Jonusauskas G., Isaacs L. Cucurbit[7]uril Complexes of Crown-Ether Derived Styryl and (Bis)styryl Dyes. // The Journal of Physical Chemistry B. 2009. V. 113. No30. P. 10149-10158.
4. Panchenko P. A., Fedorov Y. V., Perevalov V. P., Jonusauskas G., Fedorova O. A. Cation-Dependent Fluorescent Properties of Naphthalimide Derivatives with N-Benzocrown Ether Fragment. // J. Phys. Chem. A. 2010. V. 114. No12. P. 4118-4122.

Дополнительная литература

1. Казицына Л. А., Куплетская Н. Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа. 1971.
2. Преч Э. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных М.: Мир. БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006. 438 с.

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

Не используются

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

не предусмотрены.

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.

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 химической физики
курс:	<u>4</u>
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

Н.Л. Стародубцева, канд. биол. наук

В.А. Надточенко, д-р хим. наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.9 Знает перечень ведущих периодических научных изданий и способен выделять актуальные научные публикации в профессиональной области
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.7 Способен оценивать требуемые ресурсы (материальные и временные) для планирования и проведения научного эксперимента
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Современные методы исследования элементарного химического акта, веществ и материалов» обучающийся должен:

знать:

основы оптических методов детектирования;
основы абсорбционной спектроскопии;
основы спектроскопии комбинационного рассеяния;
основы оптической микроскопии.

уметь:

применять полученные знания для выбора соответствующего оптического метода;
производить обработку результатов исследований оптических и микроскопических исследований;
делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

теоретическими представлениями об оптических методах исследований;
методикой выбора и оценки применимости метода для исследования вещества, материала;
культурой постановки и моделирования экспериментальной задачи по тематике курса;
навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами веществ, материала, биомакромолекул.

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

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

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

Вопросы для подготовки к дифференцированному зачету:

1. Методологические основы оптических методов детектирования
2. Абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области
3. Спектры поглощения макромолекул
4. Абсорбционная спектроскопия в ИК-области
5. Анализ инфракрасных спектров макромолекул.
6. Классическая (нерезонансная) спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская).
7. Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния. Колебательная рамановская оптическая активность.
8. Оптическая активность. Круговой дихроизм.
9. Использование метода КД в биохимических исследованиях.
10. Оптическая микроскопия. Классическая световая микроскопия в рамках геометрической оптики.
11. Конфокальная микроскопия. Безлинзовая микроскопия
12. Классическая флуоресцентная микроскопия
13. Флуоресцентная микроскопия вне дифракционного барьера.
14. Флуоресцентно-резонансный перенос энергии.
15. Флуоресцентная спектроскопия одиночных молекул.

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 бала - 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 бала - 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 бала - 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 бал - 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

При проведении дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.