

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« _____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»
«Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»
Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия
Направленность (профиль) – Химия функциональных наноматериалов
Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20__

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки магистров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
доцент кафедры БХС

А.В. Быков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20__ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии» является получение фундаментальных знаний в области анализа структуры и строения вещества, а также химического состояния атомов элементов.

Задачами дисциплины являются:

- приобретение знаний о теоретических и экспериментальных методах исследования свойств и структуры веществ, а также путей из превращений, выборе метода исследования и постановки задачи;
- овладение основами современных методов теоретического квантово-химического, и экспериментальных физического и физико-химического анализа веществ, основными подходами к исследованию путей взаимодействия веществ;
- формирование знаний теоретических основ взаимодействия вещества и поля, применяемых в современной химии для анализа структуры, свойств, путей превращения вещества;
- формирование знаний в области теоретических методов исследования строения и свойств веществ;
- формирование навыков выбора необходимых методов исследования в зависимости от поставленной задачи;
- формирование навыков работы на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований;
- формирование навыков владения современными методами определения состава, структуры и свойств чистых веществ, их смесей, поверхностей и тонких пленок, путей превращения веществ.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 ОП. Для изучения курса требуются знания, умения и навыки, полученные в процессе изучения дисциплин: «Математика», «Физика», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Коллоидная химия», «Квантовая механика и квантовая химия».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при изучении дисциплин: «Компьютерные методы моделирования наноструктур», «Физико-химия наноструктурированных веществ», «Методы анализа поверхностей». Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем для выполнения научно-исследовательской работы, написании статей и тезисов, при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с

использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-1.1. *Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31.1. Теоретические основы методов анализа.

Уметь:

У1.1. Соотносить поставленные задачи с возможностями методов анализа.

ИОПК-1.2. *Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

32.1. Принципы работы современного оборудования используемого в изучаемых методах.

Уметь:

У2.1. Проводить поиск в справочных базах данных.

ИОПК-1.3. *Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

33.1. Теоретические основы неэмпирических и полуэмпирических методов расчёта.

Уметь:

У3.1. Планировать и проводить расчёт строения и свойств вещества на основе методов квантовой механики, молекулярной динамики и молекулярной механики.

Компетенция, закреплённая за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-2.1. *Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

34.1. Основы изучаемых методов и их ограничения.

Уметь:

У4.1. Уметь оценивать адекватность проведенных расчётов.

Компетенция, закреплённая за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-3.2. *Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

35.1. Существующие программные пакеты для расчётов из первых принципов структуры и свойств вещества;

35.2. Знать принципы организации программных пакетов для работы с реальным исследовательским оборудованием в рамках курса.

Уметь:

У5.1. Уметь использовать стандартные пакеты программ для работы на аналитических приборах в рамках курса.

ИОПК-3.3. *Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

36.1. Способы статистической обработки результатов вещественного эксперимента;

36.2. Способы обработки нативных данных программ расчёта;

Уметь:

У6.1. Обрабатывать данные вещественного эксперимента и компьютерного расчёта.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение практических работ; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
1 семестр		
Общая трудоемкость дисциплины	4	144
Аудиторные занятия (всего)		36
В том числе:		
Лекции		12
Практические занятия (ПЗ)		24
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		72+36(экз)
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		52
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		не предусмотрен
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		20+36(экз)
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0
2 семестр		
Общая трудоемкость дисциплины	3	108
Аудиторные занятия (всего)		42
В том числе:		
Лекции		14
Практические занятия (ПЗ)		28
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		30+36(экз)
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		20
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (дифференцированный зачет)		не предусмотрен
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		10+36(экз)
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1 семестр						
1	Введение. Общая характеристика физических и физико-химических методов анализа	12	2	2	-	6+2(экз)
2	Методы исследования состава и геометрического строения молекул	89	5	16	-	46+22(экз)
3	Методы исследования конденсированных состояний	43	5	6	-	20+12(экз)
	<i>Всего часов за 1 семестр</i>	144	12	24	-	72+36(экз)
2 семестр						
4	Методы исследования поверхностей	47	6	12	-	13+16(экз)
5	Методы полуэмпирической и неэмпирической квантовой химии в описании структуры и свойств веществ	47	6	12	-	13+16(экз)
6	Методы полуэмпирической и неэмпирической квантовой химии в описании межмолекулярных взаимодействий, адсорбции и путей химических реакций	14	2	4	-	4+4(экз)
	<i>Всего часов за 2 семестр</i>	108	14	28	-	30+36(экз)
Всего на дисциплину		252	26	52	-	102+72(экз)

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «ВВЕДЕНИЕ. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ФИЗИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА»

Введение в предмет «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии». Цель и задачи дисциплины. Классификация методов анализа.

Общая характеристика методов анализа. Правильность, точность, воспроизводимость. Прямая и обратная задачи методов. Анализ объема, тонких плёнок и поверхности. Спектроскопические, дифракционные и оптические методы. Характеристическое время метода. Значение физико-химических и физических методов анализа для теоретической химии.

МОДУЛЬ 2 «МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ»

Электромагнитные волны. Спектр электромагнитных волн и эффекты, вызываемые в веществе. Инфракрасная спектроскопия, УФ-спектроскопия, спектроскопия видимой области.

Ядерный магнитный резонанс.

Масс-спектрометрия. Хроматомасс-спектрометрия.

Теоретические основы методов, аппаратное оформление методов, интерпретация результатов. Границы применимости. Основные нормы и правила техники безопасности.

МОДУЛЬ 3 «МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ»

Электронная микроскопия. Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ. Рентгенфлуоресцентная спектроскопия. Термогравиметрия. Дифференциальная сканирующая калориметрия. Анализ удельной поверхности и пористости. Теоретические основы методов, интерпретация результатов. Границы применимости. Основные нормы и правила техники безопасности.

МОДУЛЬ 4 «МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ»

Идеальный и реальный кристаллы. Реальная поверхность. Процессы релаксации и реконструкции. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Оже-электронная спектроскопия. Ультрафиолетовая электронная спектроскопия. Атомно-силовая микроскопия. Туннельная микроскопия. Теоретические основы методов, аппаратное оформление методов, интерпретация результатов. Границы применимости. Основные нормы и правила техники безопасности.

МОДУЛЬ 5 «МЕТОДЫ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ И НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ В ОПИСАНИИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ»

Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета.

Иерархия расчетных методов в квантовой химии. Сравнение методов Хартри-Фока, Кона-Шема, связанных кластеров, валентных схем. Скорость, точность, воспроизводимость. Особенности и границы применимости методов при расчете структуры молекул, кластеров, компактного вещества и прогнозирования их свойств. Базисные наборы.

Полуэмпирические методы и методы молекулярной механики. Скорость, точность, границы применимости.

МОДУЛЬ 6 «МЕТОДЫ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ И НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ В ОПИСАНИИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, АДсорбЦИИ И ПУТЕЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ»

Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий. Метод супермолекулы, методы теории возмущений.

5.3. Лабораторные работы

Учебным планом лабораторные работы не предусмотрены.

5.4. Практические занятия

Таблица 3. Тематика, форма практических занятий (ПЗ) и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели практических занятий	Примерная тематика занятий и форма их проведения	Трудоемкость в часах
Модуль 1 Цель: Оценка правильности, точности и воспроизводимости методов анализа	Оценка правильности, точности и воспроизводимости и погрешности анализа на основе экспериментальных данных.	2
Модуль 2 Цель: Интерпретация состава и структуры молекул методами ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии и ЯМР	Получение и интерпретация ИК-спектров чистых соединений. Получение и интерпретация масс-спектров чистых соединений. Интерпретация ^1H -ЯМР-спектров чистых соединений	16
Модуль 3 Цель: интерпретация состава, структуры и свойств объёма конденсированных фаз	Интерпретация рентгенограмм РФА. Получение и интерпретация ТГ- и ДСК-кривых	6
Модуль 4 Цель: Интерпретация состава и топологии поверхности	Получение и интерпретация фотоэлектронных спектров. Интерпретация Оже-спектров. Исследование топологии и электропроводности поверхности методами зондовой микроскопии (атомно-силовая и туннельная микроскопии).	12
Модуль 5 Цель: Ознакомление с современными квантово-химическими пакетами	Скорость, точность, воспроизводимость расчетов небольших молекул методами Хартри-Фока, Кона-Шема и связанных кластеров в квантово-химическом пакете «Ogса». Расчет энергии активации химической реакции. Знакомство с теорией атомов в молекулах.	12
Модуль 6 Цель: Изучение способов расчета адсорбционных комплексов	Расчет энергии образования димеров молекул и учет суперпозиционной ошибки базисного набора	4

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы магистрантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к практическим занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к экзаменам.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на практические занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы практических занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии : учебник для студентов вузов : в составе учебно-методического комплекса / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. - Москва : Мир, 2006 . - 683 с. : ил. - (Методы в химии). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-03-003770-5 : 566 p. 10 к. - (ID=22545-25)

2. Физические методы исследования неорганических веществ : учеб. пособие для студентов по спец. 020101 "Химия" : в составе учебно-методического комплекса / Т.Г. Баличева [и др.]; под ред. А.Б. Никольского. - Москва : Академия, 2006. - 443 с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). - Библиогр. в тексте. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7695-2261-5 : 285 p. - (ID=59489-27)

3. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов по хим.-технол. напр. и спец. : в составе учебно-методического комплекса / В.Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с. - (Учебник для высшей школы). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9963-0080-8 : 385 p. - (ID=81208-15)

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство : учебное пособие для вузов по специальности ВПО «Фундаментальная и прикладная химия» : в составе учебно-методического комплекса / В.И. Васильева [и др.]. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 19.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1638-7. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211631>. - (ID=106014-0)

2. Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии : учеб. пособие для вузов по спец. "Органическая химия" : в составе учебно-методического комплекса / А.Т. Лебедев. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. - 493 с. - (Методы в химии) (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94774-052-4 : 171 p. - (ID=14822-2)

3. Бёккер, Ю. Спектроскопия : в составе учебно-методического комплекса / Ю. Бёккер. - Москва : Техносфера, 2009. - 527 с. - (Мир химии) (УМК-У). - Библиогр. : с. 507 - 522. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-94836-220-5 : 539 р. 10 к. - (ID=79337-1)

4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений : учеб. пособие для вузов : в составе учебно-методического комплекса / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. - Москва : БИНОМ, 2011. - 557 с. - (Методы в химии). - ISBN 978-5-94774-392-0 : 1045 р. - (ID=83559-2)

5. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии : учеб. пособие для вузов по специальности 011000 - Химия и направлению 510500 - Химия : в составе учебно-методического комплекса / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина. - Москва : БИНОМ, 2008. - 398 с. : ил., граф. - (Методы в химии). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-94774-765-2 (БИНОМ. ЛЗ) : 369 р. 60 к. - (ID=83548-2)

6. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа : учебник для вузов по хим.-техн. напр. и спец.; учебник для вузов по химико-техническим направлениям и специальностям : в составе учебно-методического комплекса. Т. 1 / Ю.М. Глубоков [и др.]; под редакцией А.А. Ищенко. - Москва : Академия, 2010. - 351 с. - (Высшее профессиональное образование. Химические технологии) (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7695-5816-4 (Т. 1) : 550 р. - (ID=83214-23)

7. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа : учебник для вузов по химико-техническим направлениям и специальностям : в составе учебно-методического комплекса. Т. 2 / Н.В. Алов [и др.]; под редакцией А.А. Ищенко. - Москва : Академия, 2010. - 351 с. - (Высшее профессиональное образование. Химические технологии) (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7695-5818-4 (Т. 2) : 550 р. - (ID=83215-23)

8. Демтредер, В. Современная лазерная спектроскопия : учебное пособие / В. Демтредер. - Москва : Интеллект, 2014. - 1071 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91559-114-0 : 2161 р. - (ID=84944-1)

9. Физические методы исследования : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - (УМК-У). - [Сервер](#). - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0517-2 : 0-00. - (ID=81121-1)

10. Физические методы исследования : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - 159 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр.: с. 156 - 157. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0517-2 : 101 р. - (ID=81497-115)

7.3. Методические материалы

1. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим. технология / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - [Сервер](#). - Текст : электронный. - 0-00. - (ID=104030-1)

2. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим. технология : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - 47 с. : ил. - (УМК-М). - Текст : непосредственный. - 49 р. 80 к. - (ID=103811-95)

3. Учебно-методический комплекс дисциплины "Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии" направления подготовки 18.04.01 Химическая технология. Профили: Технология и переработка полимеров, Технология переработки торфа и сапропеля, Химия и технология биологически активных веществ. 04.04.01 Химия. Профили: Химия функциональных наноматериалов, Аналитическая химия : ФГОС 3++ / Каф. Биотехнологии, химии и стандартизации ; сост. А.В. Быков. - 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/115942> . - (ID=115942-1)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1, 2, 3, 4. - М.: Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 р. - (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/115942>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

В таблице 4 представлен рекомендуемый перечень материально-технического обеспечения практических занятий по дисциплине.

Таблица 4. Рекомендуемое материально-техническое обеспечение дисциплины

№ пп	Рекомендуемое материально-техническое обеспечение дисциплины
1	Компьютерное и программное обеспечение
2	Инфракрасный Фурье спектрометр IR-Prestige
3	Газовый хроматомасс-спектрометр QP-2010s
4	Жидкостной хроматомасс-спектрометр API-2000
5	Термовесы TG 209 F1 <i>Iris</i>
6	Дифференциальный сканирующий калориметр DSC 204 <i>F1 Phoenix</i>
7	Класс зондовых микроскопов, зондовые микроскопы "Наноэдюкатор"
8	Лаборатория рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгенофотоэлектронный спектрометр ЭС-2403М
9	Программный пакет квантово-химических расчетов из первых принципов «Orca»
10	Программные пакеты анализа данных квантово-химических расчётов Avogadro и GabEdit

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин, соответствующих федеральным государственным образовательным стандартам высшего образования с учетом профессиональных стандартов. Типовой образец экзаменационного билета приведен в Приложении. Обучающемуся даётся право выбора заданий из числа, содержащихся в билете, принимая во внимание оценку, на которую он претендует.

Число экзаменационных билетов – 15. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 2 балла.

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен, включающий решение задач с использованием справочного материала и непрограммируемого калькулятора. При ответе на вопросы экзамена допускается использование справочного материала при решении задач.

5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:

1 семестр:

1. Общая характеристика методов анализа. Правильность, точность, воспроизводимость.

2. Методология выбора метода анализа

3. Прямая и обратная задачи методов.

4. Корректно и некорректно поставленные задачи.

5. Виды и цель анализа. Классификация.

6. Анализ объема, тонких плёнок и поверхности.

7. Характеристическое время метода.

8. Электромагнитные волны. Спектр электромагнитных волн и эффекты, вызываемые в веществе.

9. Теоретические основы инфракрасной спектроскопии.

10. Аппаратное оформление в инфракрасной спектроскопии.

11. Типичные решаемые задачи методами инфракрасной спектроскопии

12. Теоретические основы спектроскопии ультрафиолетовой и видимой области.

13. Аппаратное оформление в спектроскопии ультрафиолетовой и видимой области.

14. Типичные решаемые задачи методами спектроскопии ультрафиолетовой и видимой области.

15. Теоретические основы спектроскопии ядерного магнитного резонанса: протон в магнитном поле, экранирование, дезэкранирование, химический сдвиг.

16. Аппаратное оформление в спектроскопии ядерного магнитного резонанса.

17. Типичные решаемые задачи методами ядерного магнитного резонанса.

18. Теоретические основы масс-спектрометрии.

19. Аппаратное оформление в масс-спектрометрии и хроматомасс-спектрометрии.

20. Типичные решаемые задачи методами масс-спектрометрии и хроматомасс-спектрометрии.

21. Электронная микроскопия. Принципы метода растровой и просвечивающей электронной микроскопии.

22. Аппаратное оформление в электронной микроскопии.

23. Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ. Теоретические основы методов.

24. Аппаратное оформление в рентгенофазовом анализе.

25. Рентгенофазовый анализ. Типично решаемые задачи.

26. Рентгенфлуоресцентная спектроскопия. Теоретические основы метода.

27. Аппаратное оформление метода рентгенфлуоресцентной спектроскопии.

28. Рентгенфлуоресцентная спектроскопия. Типично решаемые задачи.

29. Термогравиметрия. Теоретические основы метода.

30. Аппаратное оформление метода термогравиметрии.

31. Термогравиметрия. Типично решаемые задачи.

32. Дифференциальная сканирующая калориметрия. Теоретические основы метода.

33. Аппаратное оформление метода в методе дифференциальной сканирующей калориметрии.

34. Анализ удельной поверхности и пористости.

2 семестр:

1. Идеальный и реальный кристаллы. Реальная поверхность.

2. Процессы релаксации и реконструкции реальной поверхности.

3. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Теоретические основы метода.

4. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Аппаратное оформление метода.

5. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Типично решаемые задачи.

6. Оже-электронная спектроскопия. Теоретические основы метода.

7. Оже-электронная спектроскопия. Аппаратное оформление метода.

8. Оже-электронная спектроскопия. Типично решаемые задачи.

9. Вакуумная ультрафиолетовая электронная спектроскопия. Теоретические основы метода.

10. Вакуумная ультрафиолетовая электронная спектроскопия. Аппаратное оформление метода.

11. Вакуумная ультрафиолетовая электронная спектроскопия. Типично решаемые задачи.

12. Атомно-силовая микроскопия. Принцип метода.

13. Туннельная микроскопия. Принцип метода.

14. Зондовая микроскопия. Аппаратное оформление.

15. Зондовая микроскопия. Типично решаемые задачи.

16. Приближение Борна-Оппенгеймера.

17. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета.
18. Иерархия расчетных методов в квантовой химии.
19. Базисные наборы. Виды. Цель использования.
20. Сравнение методов Хартри-Фока, Кона-Шема, связанных кластеров, валентных схем по скорости расчёта, точности, воспроизводимости свойств.
21. Особенности и границы применимости неэмпирических методов при расчете структуры молекул, кластеров, компактного вещества и прогнозирования их свойств.
22. Особенности и границы применимости полуэмпирических методов при расчете структуры молекул, кластеров, компактного вещества и прогнозирования их свойств.
23. Методы молекулярной механики. Скорость, точность, границы применимости.
24. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании студента покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного студенту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

Учебным планом зачет по дисциплине не предусмотрен.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

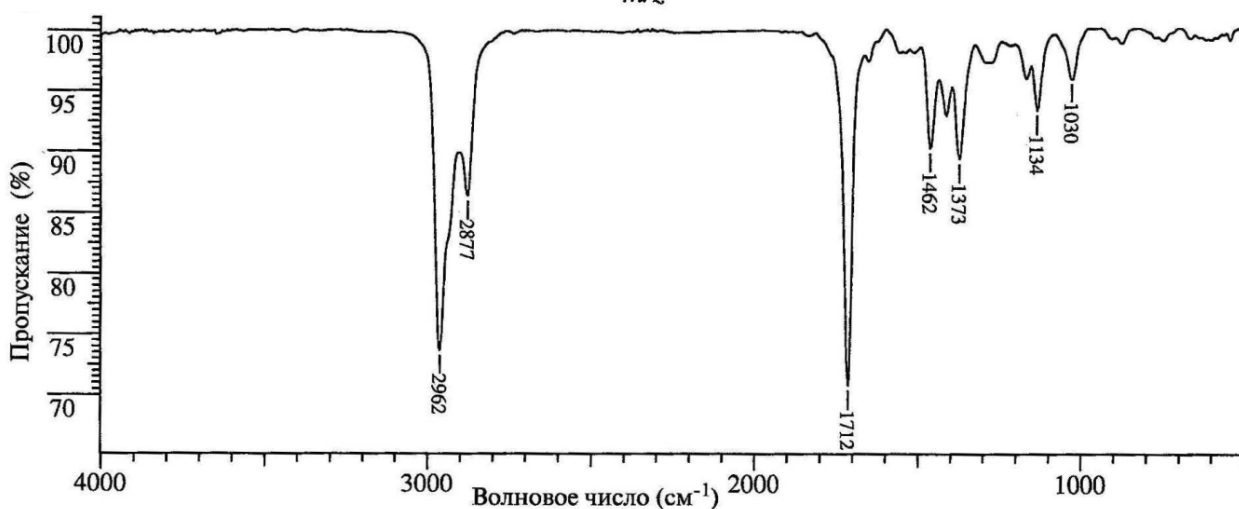
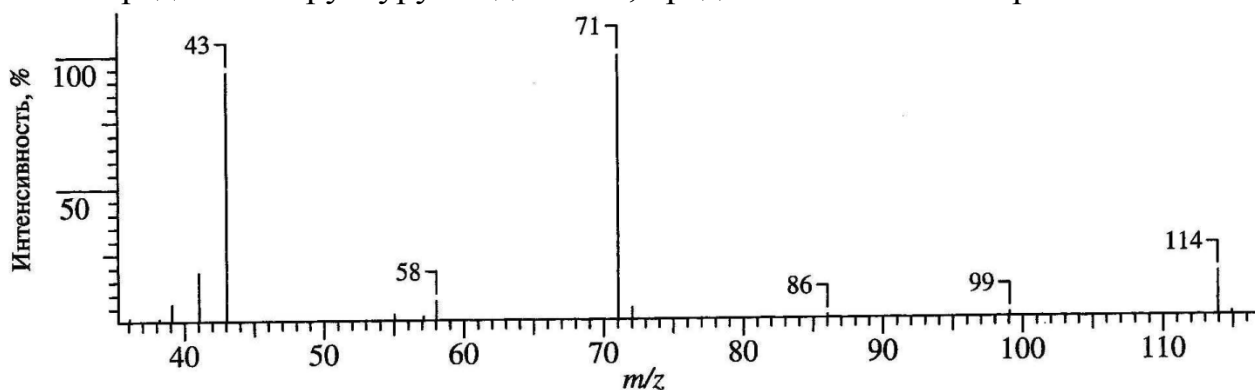
Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

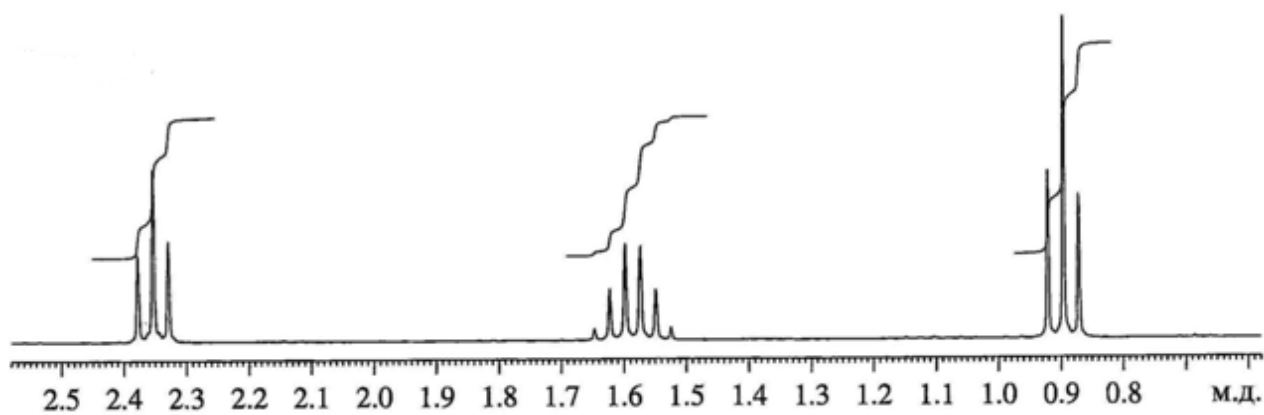
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
 высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия
 Профиль – Химия функциональных наноматериалов
 Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
 Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»
 Семестр 1

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Задание для проверки уровня «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:
 Теоретические основы инфракрасной спектроскопии.
2. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
 Аппаратное оформление метода термogrавиметрии.
3. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
 Определите структуру соединения, представленного спектрами:





Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2 балла;

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

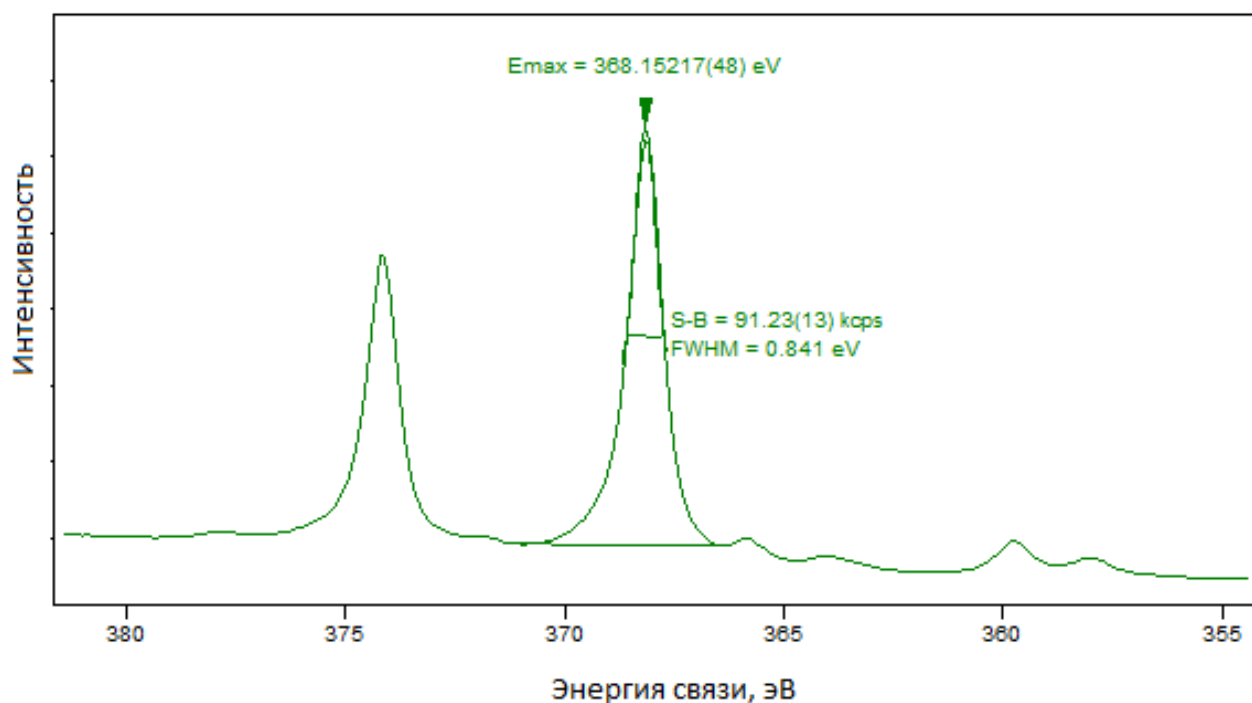
М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

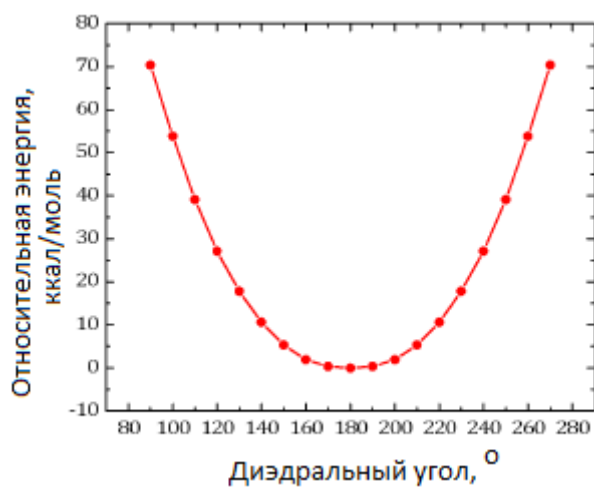
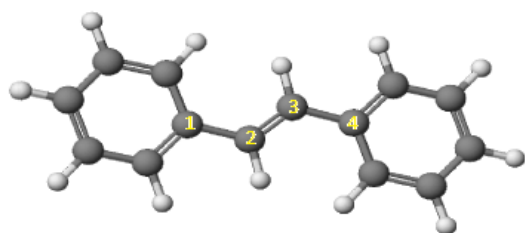
Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия
Профиль – Химия функциональных наноматериалов
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»
Семестр 2

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Задание для проверки уровня «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:
Оже-электронная спектроскопия. Теоретические основы метода.
2. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
В представленном фотоэлектронном спектре высокого разрешения определите тип подуровня, элемент и его степень окисления.



3. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
Объясните наблюдаемую закономерность для приведённого вещества.



Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2 балла;

Составитель: доц. кафедры БХС

А.В. Быков

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман