

**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**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Теория и практика физических методов в химии
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики функциональных материалов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

1 (осенний) - Дифференцированный зачет

2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 180 всего, в том числе:

лекции: 60 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 120 час.

Самостоятельная работа: 180 час.

Всего часов: 360, всего зач. ед.: 8

Программу составил: В.В. Новиков, д-р хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики функциональных материалов 27.05.2021

## Аннотация

Дисциплина "Теория и практика физических методов в химии" предназначена для ознакомления обучающихся с основными принципами работы на современных приборах для исследования физико-химических свойств вещества и статистическими методами обработки полученных результатов

Задачи дисциплины:

формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования свойств и структуры вещества, получение практического навыка в проведении различных видов анализа свойств и структуры вещества, подготовки образцов для подобного анализа и интерпретации полученных результатов

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы методов исследования строения и физико-химических свойств
- физические и химические принципы работы оборудования и приборов проведения исследований вещества;
- основные конструкционные элементы измерительных приборов, применяемых для методов исследования вещества, и их назначение
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных;

уметь:

- планировать стратегию установления строения вещества;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества с использованием основных методологических принципов;
- использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты,
- готовить образцы для проведения различных исследований свойств и структуры материалов

владеть:

- практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов.
- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.

Основное содержание дисциплины изложено в следующих разделах:

- 1 Введение
- 2 Метрологические и статистические основы обработки результатов эксперимента
- 3 Спектроскопия протонного магнитного резонанса
- 4 Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР
- 5 Спектроскопия ЯМР на гетероядрах и двумерная спектроскопия ЯМР
- 6 Принципы работы на современных ИК и УФ-вид спектрометрах
- 7 Проведение рентгенодифракционного эксперимента
- 8 Электрохимические методы
- 9 Титриметрические методы
- 10 Масс-спектрометрия для качественного и количественного анализа

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Целью курса "Теория и практика физических методов в химии" является ознакомление обучающихся с основными принципами работы на современных приборах для исследования физико-химических свойств вещества и статистическими методами обработки полученных результатов

### Задачи дисциплины

формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования свойств и структуры вещества, получение практического навыка в проведении различных видов анализа свойств и структуры вещества, подготовки образцов для подобного анализа и интерпретации полученных результатов

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы методов исследования строения и физико-химических свойств
- физические и химические принципы работы оборудования и приборов проведения исследований вещества;
- основные конструкционные элементы измерительных приборов, применяемых для методов исследования вещества, и их назначение;
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных.

уметь:

- планировать стратегию установления строения вещества;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества с использованием основных методологических принципов;
- использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты;
- готовить образцы для проведения различных исследований свойств и структуры материалов.

владеть:

- практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов;
- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.

#### 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	2			1
2	Метрологические и статистические основы обработки результатов эксперимента	4		4	20
3	Спектроскопия протонного магнитного резонанса	6		14	20
4	Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР	6		14	20
5	Спектроскопия ЯМР на гетероядрах и двумерная спектроскопия ЯМР	6		14	20
6	Принципы работы на современных ИК и УФ-вид спектрометрах	6		14	9
7	Проведение рентгенодифракционного эксперимента	8		14	20
8	Электрохимические методы	8		18	20
9	Масс-спектрометрия для качественного и количественного анализа	8		14	30
10	Методы разделения и концентрирования. Хроматография	6		14	20
Итого часов		60		120	180
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		360 час., 8 зач.ед.			

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

## 1. Введение

Цели и задачи дисциплины.

## 2. Метрологические и статистические основы обработки результатов эксперимента

Понятие об измерении и шкале. Номинальная и ординальная шкалы. Относительные и абсолютные погрешности, погрешность косвенных измерений. Обнаружение промахов. Измерения как реализация выборки из генеральной совокупности. Несмещенные оценки параметров распределения. Нормальное распределение, распределения Стьюдента, Фишера и хи-квадрат. Определение параметров аппроксимирующих функций. Проверка статистических гипотез. Ошибки первого и второго рода. Использование методов непараметрической статистики. Шумы при измерениях и их влияние на погрешности. Модуляционные методы натурального эксперимента. Информационно-экспертные системы как основа проведения натурального эксперимента. Основы регрессионного и дисперсионного анализа. Особенности технологического эксперимента. Понятие о планировании эксперимента. Перспективные методы статистической обработки результатов натурального эксперимента

## 3. Спектроскопия протонного магнитного резонанса

Явление ядерного магнитного резонанса. Основные характеристики одномерных спектров ЯМР – химический сдвиг, константы спин-спинового взаимодействия. Подход к анализу спектров ЯМР первого порядка. Особенности интерпретации спектров сильно связанных систем. Подготовка образца к исследованию. Основные блоки спектрометра. Стадии регистрации спектра: настройка добротности резонатора, шиммирование магнитного поля, обработка спадов свободной индукции. Принципы выбора параметров регистрации спектра

## 4. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР

Интенсивность поглощения. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР. Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации. Анизотропия электронного экранирования. Спин-вращательное взаимодействие. Квадрупольное взаимодействие. Время корреляции. Спиновое эхо. Последовательность КПМГ. Экспериментальное определение времен релаксации T1 и T2. Понятие о динамическом ЯМР, примеры динамических процессов, исследованных методом ДЯМР. Временная шкала метода ДЯМР

## 5. Спектроскопия ЯМР на гетероядрах и двумерная спектроскопия ЯМР

Химические сдвиги гетероядер и константы спин-спинового взаимодействия с участием гетероядер ( $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ , переходные и непереходные металлы). Перенос поляризации на ядра с низкой чувствительностью. Основные принципы двумерной спектроскопии ЯМР, гетеро- и гомоядерная двумерная корреляционная спектроскопия. Двумерные импульсные методики, основанные на ядерном эффекте Оверхаузера. Определение строения неизвестного органического соединений на основе спектров COSY, NOESY, HSQC и HMBC. Диффузионно-упорядоченная спектроскопия DOSY. Многомерная спектроскопия ЯМР в структурной биологии

## 6. Принципы работы на современных ИК и УФ-вид спектрометрах

Особенности взаимодействия излучения с веществом. Характеристическое время различных спектроскопических методов. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Молекулярные термы. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Правила Вудворда-Физера. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений. Структурные области ИК спектра. Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру. Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра. Электронные переходы, их классификация и правила отбора. Колебательная и вращательная структура спектров. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах.

## Семестр: 2 (Весенний)

### 7. Проведение рентгенодифракционного эксперимента

Рассеяние рентгеновских лучей электроном, атомом. Атомный фактор рассеяния. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Понятие структурной амплитуды и структурного фактора. Расчет структурных амплитуд. Понятие фактора Лоренца и поляризационного фактора. Интенсивность отражений. Предварительные исследования и получение данных для структурных определений. Законы погасания. Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ. Регистрация рентгеновского излучения. Рентгеновские дифрактометры (с точечными детекторами, с координатными детекторами). Отбор и центрировка кристалла на монокристалльном дифрактометре. Знакомство с программными комплексами для структурной расшифровки. Критерии оценки правильности структурного уточнения

### 8. Электрохимические методы

Электрохимическая цепь и электрохимическая реакция. Основные процессы, протекающие на электродах в электрохимической ячейке. Кинетика электрохимических процессов. Неравновесные явления в растворах электролитов. Поляризационная кривая. Классификация методов. Потенциометрия. Потенциометрическое титрование с неполяризованными и поляризованными электродами. Зависимость формы кривой и скачка потенциалов от различных факторов. Титрование в водных и неводных средах. Способы обнаружения конечной точки титрования. Кулонометрия. Теоретические основы кулонометрического метода анализа и его классификация. Условия проведения кулонометрических измерений. Прямая потенциостатическая и гальваностатическая кулонометрия. Кулонометрическое титрование, его возможности и преимущества. Вольтамперометрия. Явления поляризации и перенапряжения. Современные варианты вольтамперометрии: импульсные (нормальный и дифференциальный), переменного тока (с фазовой и временной селекцией аналитического сигнала), инверсионные (вольтамперометрия и хронопотенциометрия). Их особенности. Метрологические характеристики, возможности и ограничения методов. Амперометрическое титрование (кривые титрования, выбор потенциала, электроды). Особенности амперометрического титрования с одним и двумя поляризованными электродами; объекты анализа, характеристики метода. Кондуктометрия. Прямая низкочастотная кондуктометрия и кондуктометрическое титрование. Использование кондуктометрических датчиков в хроматографии и других методах анализа

### 9. Масс-спектрометрия для качественного и количественного анализа

Основные блоки масс-спектрометра. Основные подходы к ионизации – электронный удар, химическая ионизация, FAB, электроспрей, химическая ионизация при атмосферной давлении, фотоионизация при атмосферном давлении, MALDI. Различные системы ввода образца, ограничения на диапазон изучаемых веществ. Типы и принципы работы масс-анализаторов (квадруполь, ионная ловушка, магнитный сектор, времяпролетный). Фурье-масс-анализаторы (орбитап, ион-циклотронный резонанс). Тандемные методики, тройной квадруполь, MS/MS. Интерпретация масс-спектров, полученных путем ионизации электронным ударом при использовании библиотек спектров и в их отсутствии. Ассоциаты ионов в ESI-MS спектрах. Пробоподготовка, подходы к выбору методики для конкретной химической задачи. Масс-спектрометрия для изучения строения высокомолекулярных соединений

#### 10. Методы разделения и концентрирования. Хроматография

Классификация хроматографических методов по применяемым фазам, механизмам разделения и технике эксперимента. Методы получения хроматограмм (фронтальная, элюентная и вытеснительная хроматография). Эффективность и селективность хроматографического разделения. Концепция теоретических тарелок и ее недостатки. Уравнение Ван-Деемтера. Общие подходы к оптимизации процесса хроматографического разделения веществ. Способы осуществления хроматографического процесса. Особенности хроматографических колонок. Способы элюирования веществ. Детекторы. Виды жидкостной и газовой хроматографии, сорбционные методы

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

Учебная аудитория, оснащенная мультимедийным проектором и экраном.

Самостоятельная работа студента обеспечивается доступностью библиотечного фонда ИНЭОС РАН.

Практикум по физическим методам осуществляется с использованием приборной базы ИНЭОС РАН:

- 1) Спектрометр ЯМР Bruker Avance 300
- 2) Рентгеновский дифрактометр Bruker D8 Quest
- 3) Спектрофотометр Shimadzu UV-2600i
- 4) ГХ-МС спектрометр Shimadzu QP-2020
- 5) ВЭЖХ-МС-спектрометр Shimadzu LCMS-2020
- 6) Потенциостат-гальваностат Metrohm Autolab

### 6. Перечень рекомендуемой литературы

#### Основная литература

1. Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков - М. Мир, 2006
2. Физические методы в химии : в 2 т. Т. 1 / Р. Драго ; пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова .— М. : Мир, 1981 .— 422 с.
3. Физические методы в химии : в 2 т. Т. 2 : / Р. Драго ; пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова .— М. : Мир, 1981 .— 456 с.
2. У. Кунце, Г. Шведт. Основы качественного и количественного анализа. Пер. с нем. М.: Мир. 1997.
3. Деденко Л.Г., Керженцев В.В. Математическая обработка и оформление результатов эксперимента. - М.: Издательство МГУ, 1977 г. - 112 с.
4. Крамер Г. Математические методы статистики. Изд. 2-е, стереотип. - М.: "Мир", 1975 г. - 648 с.
6. Методы исследований в экспериментальной физике : учеб. пособие для вузов / М. И. Пергамент .— М. : Интеллект, 2010 .— 304 с.
6. Сысоев А.А., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М., Атомиздат, 1977.
7. Л.Н. Москвин, Л.Г. Царицына. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Л.: Химия. 1991..

#### Дополнительная литература

1. Р.А. Хмельницкий, Е.С. Бродский. Хромато-масс-спектрометрия. М.: Химия. 1983.
2. Карпов Ю.А., Савостин А.П., Глинская И.В. Методы пробоотбора и пробоподготовки. Курс лекций. Изд-во МИСиС. 2001.
3. М. Отто. Современные методы аналитической химии. В 2-х томах. Пер. с нем. и под ред. А.В. Гармаша. М.: Техносфера. Т.1. 2003. Т.2. 2004.
4. К.А. Гольдберг, М.С. Вигдергауз. Введение в газовую хроматографию. М.: Химия. 1990
5. Масс-спектрометрия в органической химии : учеб. пособие для вузов / А. Т. Лебедев — М. : БИНОМ. Лаб. знаний, 2009 .— 493 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, 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;
- 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.



**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики функциональных материалов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестры, формы промежуточной аттестации:	
1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
2 (весенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	В.В. Новиков, д-р хим. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Теория и практика физических методов в химии» обучающийся должен:

### знать:

- теоретические основы методов исследования строения и физико-химических свойств
- физические и химические принципы работы оборудования и приборов проведения исследований вещества;
- основные конструкционные элементы измерительных приборов, применяемых для методов исследования вещества, и их назначение;
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных.

### уметь:

- планировать стратегию установления строения вещества;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества с использованием основных методологических принципов;
- использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты;
- готовить образцы для проведения различных исследований свойств и структуры материалов.

### владеть:

- практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов;
- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.

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

В целях текущего контроля успеваемости в начале каждой лекции проводятся краткие опросы по теме предыдущей лекции.

Каждая лабораторная работа оканчивается сдачей письменного отчета, а также подробным опросом по теме лекции, освещающей тематику лабораторной работы.

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

Вопросы к дифференцированному зачету в осеннем семестре (вопросы к коллоквиумам):

1. Понятие спин-спинового взаимодействия в спектроскопии ЯМР, константы спин-спинового взаимодействия и их связь со строением молекул.
2. Уравнение резонанса.
3. Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации.
4. Время корреляции. Спиновое эхо. Последовательность КПМГ.
5. Экспериментальное определение времен релаксации T1 и T2.
6. Понятие о динамическом ЯМР, примеры динамических процессов, исследованных методом ДЯМР.
7. Эталоны для определения химических сдвигов гетероядер.
8. Нормальное распределение, распределения Стьюдента, Фишера и хи-квадрат.
9. Ошибки первого и второго рода.
10. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений.
11. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы.
12. Принцип работы ИК спектрофотометра.
13. Электронные переходы, их классификация и правила отбора.
14. Принцип работы УФ спектрофотометра.
15. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах.

Вопросы к дифференцированному зачету в весеннем семестре (вопросы к коллоквиумам):

1. Понятие химического сдвига в спектроскопии ЯМР, константа экранирования и ее составляющие.
2. Слабо- и сильносвязанные спиновые системы, знаки КССВ.
3. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР.
4. Спин-вращательное взаимодействие.
5. Квадрупольное взаимодействие.
6. Химические сдвиги гетероядер и константы спин-спинового взаимодействия с участием гетероядер ( $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ , переходные и непереходные металлы).
7. Ядерный эффект Оверхаузера.
8. Одномерные ЯМР эксперименты, использующие сложные импульсные последовательности (INEPT, DEPT, JMODECHO).
9. Понятие о двумерной корреляционной спектроскопии ЯМР, основные методики –  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  и  $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  COSY, NOESY, EXSY.
10. Шумы при измерениях и их влияние на погрешности.
11. Модуляционные методы натурального эксперимента.

12. Информационно-экспертные системы как основа проведения натурального эксперимента.
13. Использование методов непараметрической статистики.
14. Характеристическое время различных спектроскопических методов.
15. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп.
16. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений.
17. Понятие структурной амплитуды и структурного фактора.
18. Рентгеновские дифрактометры (с точечными детекторами, с координатными детекторами).
19. Отбор и центрировка кристалла на монокристалльном дифрактометре.
20. Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ.
21. Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ.
22. Потенциометрия. Потенциометрическое титрование с неполяризованными и поляризованными электродами.
23. Кулонометрия. Теоретические основы кулонометрического метода анализа и его классификация.
24. Вольтамперометрия. Явления поляризации и перенапряжения.
25. Амперометрическое титрование (кривые титрования, выбор потенциала, электроды). Особенности амперометрического титрования с одним и двумя поляризованными электродами; объекты анализа, характеристики метода.
26. Кондуктометрия. Прямая низкочастотная кондуктометрия и кондуктометрическое титрование.
27. Использование кондуктометрических датчиков в хроматографии и других методах анализа.
28. Расчет молярной массы эквивалента в разных методах титрования.
29. Индикаторные погрешности. Краткая характеристика различных методов.
30. Системы регистрации ионов, система сбора и обработки данных.
31. Конструкция и основные типы масс-спектральных приборов.
32. Хромато-масс-спектрометрия.
33. Классификация хроматографических методов по применяемым фазам, механизмам разделения и технике эксперимента.
34. Общие подходы к оптимизации процесса хроматографического разделения веществ.

#### Критерии оценивания

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Каждая лабораторная работа предполагает оформление письменного отчета и сдачу коллоквиума. Оценка за семестр выставляется как среднее арифметическое по оценкам за коллоквиумы.