



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО

Руководитель ОП Т.П. Кустова

29 августа 2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Физические методы исследования био- и наносистем

Уровень высшего образования:	магистратура
Квалификация выпускника:	магистр
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Нанобиотехнологии



1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Физические методы исследования био- и наносистем» является подготовка к научно-исследовательской деятельности для решения задач, связанных с идентификацией соединений, изучением их состава, строения и реакционной способности. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных возможностях решения структурных задач разного уровня, умения делать правильный выбор методов для получения достоверной информации и интерпретировать полученные результаты.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Физические методы исследования био- и наносистем» относится к обязательной части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений.

Курс базируется на результатах освоения базовых химических дисциплин и навыках работы с учебной и научной литературой в ЭБС, приобретенных в бакалавриате, а также на дисциплинах магистратуры «Структурная химия и компьютерное моделирование био- и наносистем», «Приоритетные направления развития химии в XXI веке».

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать: свойства химических элементов, простых молекул и сложных соединений в различном агрегатном состоянии, фундаментальные закономерности физических явлений, общие представления о закономерностях протекания химических реакций, технику безопасности в химической лаборатории;

Уметь: проводить физический эксперимент, готовить рабочие растворы заданной концентрации, обрабатывать и обсуждать экспериментальные зависимости, пользоваться учебной, научной и справочной литературой, сетью Интернет;

Иметь: навыки использования компьютерных программ для количественной статистической обработки результатов эксперимента; навыки владения терминологией дисциплин фундаментальной химии; навыки проведения химических экспериментов; навыки пользования физико-химическими методами анализа веществ.

Освоение данной дисциплины необходимо при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы (магистерской диссертации) и решении научно-исследовательских и производственно-технологических задач в будущей профессиональной деятельности (идентификация соединений, определение степени их чистоты, природы примесей, получение информации о геометрии соединений в разных фазах, характере межмолекулярных взаимодействий, характеристик электрических, магнитных, оптических свойств веществ и т.д.).

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) общепрофессиональные (ОПК):

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;

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



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

б) профессиональные (ПК):

ПК-3: Способен выявлять актуальные научные проблемы в химии, в том числе в области нанобиотехнологий, и разрабатывать подходы к их решению.

ПК-4: Способен проводить научные исследования в химии и смежных наук самостоятельно и в составе исследовательских коллективов

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- классификацию и основы физических методов исследования; области применения, метрологические характеристики, достоинства и недостатки классических физических методов, тенденции их развития (**ОПК-2, ПК-3**);
- принципы устройства приборов и инструментов, основы пробоподготовки, правила работы на приборах; методики проведения физических экспериментов, методики анализа исследуемых образцов (**ОПК-1, ПК-4**);
- методики получения и обработки экспериментального материала, получаемого в различных методах физического исследования и методики интерпретации результата (**ОПК-2, ОПК-3**),
- нормы техники безопасности и пожарной безопасности при работе в химической лаборатории (**ОПК-1, ПК-4**).

Уметь:

- применять знание основных физических закономерностей при получении полученных экспериментальных результатов в своей научной деятельности; выбирать оптимальный метод исследования для выполнения конкретной работы; (**ОПК-2, ПК-3**);
- работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований, получать экспериментальные данные (**ОПК-1, ПК-4**);
- пользоваться современными компьютерными базами спектров, спектральных характеристик, анализировать полученные результаты, идентифицировать, представлять и оформлять результаты исследования (**ОПК-2, ОПК-3**);
- пользоваться защитными средствами при проведении синтетических работ с участием ЛВЖ, СДЯВ, а также противопожарными средствами; оказывать помощь при возникновении чрезвычайных случаев поражения человека вследствие неаккуратного применения взрывоопасных и пожароопасных веществ (**ПК-4**);

Иметь:

- навыки владения основными понятиями спектроскопии базовыми уравнениями, лежащими в основе методов (**ОПК-2, ПК-3**);
- навыки свободного владения справочной литературой, в том числе с привлечением информационных баз данных; навыки поиска и первичной обработки научной и научно-технической информации с привлечением современных баз данных (**ОПК-2, ОПК-3**),
- навыки работы на серийном оборудовании для проведения физико-химических исследований (**ОПК-1, ПК-4**);
- навыки работы с методиками обработки экспериментального материала, методиками статистической обработки данных, оценки точности и надежности полученных результатов физических экспериментов (**ОПК-3**).
- навыки применения средств защиты от поражения кожи и дыхательной системы, а также средств пожаротушения (**ОПК-1, ПК-4**);



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет **4** зачетные единицы (144 академических часа) – **2** семестр;
5 зачетных единиц (180 академических часов) – **3** семестр.

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем		Формы текущего контроля успеваемости
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	Формы промежуточной аттестации
2 семестр					
1	Введение. Классификация методов. Применение.	2	2	-	
	Масс-спектрометрия	2	4	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 1
	Спектроскопия ЯМР	2	2	4 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 2
2	Практический рентгеноструктурный анализ	2	2	4 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 3
3	Введение в молекулярную спектроскопию. Методы флуоресцентной спектроскопии	2	4	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 4
Итого за семестр:			14	12	Зачет с оценкой
3 семестр					
5	ИК-спектроскопия	3	4	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 5
6	Спектроскопия комбинаци- онного рассеяния света	3	2	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 6
7	Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и ОЖ- спектроскопия	3	2	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 7
8	Вращательная (микроволновая) спектроскопия	3	2	2 практ. занятие	Практическая работа Контрольная работа № 8
	Использование физических методов исследования в нанобиотехнологиях	3	2	2 практ. занятие	Презентация проекта, выступление с докладом.
Итого:			12	10	Экзамен
Итого по дисциплине:			26	22	

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам) 2 семестр



Масс-спектрометрия. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электрическое неоднородное поле, химическая ионизация. Ионный ток и сечение ионизации. Зависимость сечения ионизации от энергии ионизирующих электронов. Потенциалы появления токов. Принцип Франка-Кондона. Вертикальные и адиабатические переходы. Диссоциативная ионизация. Типы ионов в масс-спектрах: молекулярные, осколочные, многозарядные, отрицательные, перегруппировочные, метастабильные. Принципиальные схемы масс-спектрометров. Магнитный масс-спектрометр. Динамические масс-спектрометры. Спектрометр ион-циклотронного резонанса. Применение масс-спектрометрии. Идентификация и установление строения веществ. Расшифровка масс-спектров. Определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Термодинамические исследования. Определение парциальных давлений компонентов газовых смесей. Условия испарения вещества. Эффузионная ячейка Кнудсена. Определение теплоты сублимации, теплоты реакции и константы равновесия.

Спектроскопия ЯМР. Физические основы методов. Магнитные моменты ядер и электронов. Поведение магнитоактивных частиц во внешнем магнитном поле. Зеемановское расщепление уровней, Больцмановское распределение спинов ядер и электронов. Переходы между уровнями, условия ядерного магнитного и электронного парамагнитного резонанса. Реализация условий ядерного магнитного резонанса. Принципиальная блок-схема ЯМР-спектрометра стационарного типа и импульсного Фурье-спектрометра ЯМР. Техника и методика эксперимента. Общий вид спектра ЯМР и его обзорный анализ. Число сигналов, их форма, положение в спектре, интенсивность. Химический сдвиг, спин-спиновое расщепление, времена продольной и поперечной релаксации. Применение в химии спектроскопии ЯМР ^1H . Структурный анализ индивидуальных соединений, донорно-акцепторных и H -комплексов, хиральных молекул. Количественный анализ смеси. Изучение быстро протекающих процессов (химический обмен ядер, внутреннее вращение). Обнаружение и характеристика структуры интермедиатов в химических реакциях (карбокатионы, ионные пары и т.п.). Определение термодинамических характеристик химических реакций. Применение в структурно-аналитических целях спектроскопии магнитного резонанса на ядрах ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F , ^{77}Se и др. Сравнение метода ЯМР с другими методами, его достоинства и ограничения.

Практический рентгеноструктурный анализ. Общие особенности дифракционных методов. Уравнение Шредингера для задачи рассеяния фотона, электрона или нейтрона на объекте исследования. Амплитуды рассеяния. Получение рентгеновских лучей. Характеристическое излучение. Общие особенности дифракции рентгеновских лучей. Уравнение Брегга. Метод порошка Дебая-Шеррера. Метод монокристалла Брегга. Определение параметров кристаллической структуры. Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. Методы расшифровки и уточнения кристаллических структур по рентгеновским дифракционным данным от монокристаллов и поликристаллов (порошков). Методы исследования реальной структуры монокристаллов по диффузному рассеянию рентгеновских лучей. Рентгеновские дифракционные методы исследования структуры наноматериалов.

Методы флуоресцентной спектроскопии. Явление флуоресценции. Спектры возбуждения и испускания флуоресценции. Флуоресцентные молекулы и материалы. Метод флуоресцентной спектроскопии для обнаружения, определения концентрации, изучения структуры, стабильности и взаимодействия биологических объектов – от молекул и их комплексов до клеток и тканей. Эффект внутреннего фильтра. Спектральные флуориметры - устройство, принцип действия. Анализ спектров излучения флуоресценции; анализ спектров возбуждения флуоресценции. Построение трехмерной матрицы зависимости спектров флуоресценции от длины волны возбуждения – "отпечатка пальцев" исследуемых молекул. Исследование кинетики



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

флуоресценции. Получение спектров или исследование кинетики поглощения и пропускания. Флуоресцентная спектроскопия для исследования коллоидных квантовых точек.

3 семестр

Методы колебательной спектроскопии. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Симметрия молекул и нормальных колебаний. Классификация нормальных колебаний. Основные, или фундаментальные полосы, обертоны, нормальных колебаний. Основные, или фундаментальные полосы, обертоны, составные и разностные полосы. Интенсивность колебаний. Форма полосы. Правила отбора. Резонанс Ферми. Эффекты кристалличности. Характеристические частоты. Концепция групповых колебаний, ее достоинства и недостатки. Важнейшие области колебательных спектров (обзорный анализ). Принципы устройства и действия ИК-спектрометров. Фурье-спектроскопия. Характер и подготовка образцов. Применение ИК- и КРС-спектроскопии в химии. Структурно-групповой анализ на основе данных каждого метода, выводы из сопоставления ИК- и КР-спектров относительно симметрии и тонких аспектов строения молекул. Идентификация структуры (область "отпечатка пальцев", колебания функциональных групп и отдельных структурных фрагментов, качественный и количественный анализ многокомпонентных смесей, характер и степень координации лигандов в устойчивых комплексах и т.п.). Исследование пространственной структуры молекул (форма, симметрия, геометрическая изомерия, конформационный анализ). Анализ внутримолекулярных электронных взаимодействий (эффект поля, эффекты сопряжения и т.д.), характеристика дипольных моментов и поляризуемостей отдельных связей, фрагментов и т.д. Нахождение силовых полей молекулы, корреляции, силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул. Использование фундаментальных частот для расчета колебательных вкладов в термодинамические функции. Исследование межмолекулярных взаимодействий (комплексы с водородной связью, комплексы с переносом заряда, сольватационные эффекты, координационный катализ и т.п.). Исследования равновесий. Кинетические исследования. Расшифровка структуры на основании данных метода ИК-спектроскопии.

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и ОЖ-спектроскопия. Физические основы метода РФЭС. Фотоионизация основного уровня рентгеновским излучением. Оже-процесс в РФЭС. Фотоэлектронный спектр. Тонкая структура спектров РФЭС. Химический сдвиг фотоэлектронных и оже-линий. Спектры валентной зоны. Спектральное разрешение в методе РФЭС. Оборудование для метода РФЭС. Методика анализа спектров в методе РФЭС. Математическая обработка спектров. Методы расчета концентрации элементов. Послойный анализ в методе РФЭС. Ионное распыление. Разрешение по глубине при послойном анализе.

Вращательная (микроволновая) спектроскопия. Вращательные переходы молекул. Вращательный спектр двухатомной молекулы. Микроволновый спектрометр, устройство, принцип действия. Измерение дипольных моментов молекул. Изучение строения неустойчивых частиц (радикалов, ионов, промежуточных продуктов, образующихся в результате пиролиза или при действии электрического разряда).

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Приоритетные направления развития химии в XXI веке» используются следующие образовательные технологии:

- ✓ проектная технология,
- ✓ технология развития критического мышления;
- ✓ технология учебной дискуссии;
- ✓ групповая работа.



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- ✓ технологии смешанного обучения (чтение лекций с использованием мультимедийных презентаций; использование ЭИОС «Мой университет» при подготовке).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе обучающихся с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме и выбранной теме проекта;
- подготовке отчетов к лабораторным работам в соответствии с требованиями,
- подготовке к контрольным работам, к текущему и итоговому контролю;
- использовании материалов из тематических информационных ресурсов и учебной литературы при подготовке реферата, презентации и доклада по теме проектного задания;
- подготовке к зачету с оценкой (**2 семестр**);
- подготовка к экзамену (**3 семестр**).

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в Приложении 1 к рабочей программе дисциплины в ЭИОС «Мой университет».

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

2 семестр:

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: практические работы, контрольные работы (вопросы для контрольных работ) и защита проекта. Для проведения итогового контроля – зачет с оценкой (вопросы для подготовки к зачету). Зачет с оценкой проводится в устной форме. Для их оценки создана рейтинговая система, в рамках которой обучающиеся могут набрать по данной дисциплине за семестр максимально 100 баллов, из них 15 баллов – за практические работы (3 работы по 5 баллов). 30 баллов – за контрольные работы (3 работы по 10 баллов), 15 баллов – защита проекта с презентацией (10 баллов – реферат и 5 баллов - презентация).

Ответ на зачете с оценкой оценивается из расчета в 40 баллов.

Для получения зачета с оценкой «отлично» обучающиеся должны набрать не менее 85 баллов; для получения зачета с оценкой «хорошо» - не менее 70 баллов; для получения зачета с оценкой «удовлетворительно» - не менее 55 баллов.

Типовые варианты вопросов находятся в Приложении 2 к РП «Фонд оценочных средств».

3 семестр:

В рамках рейтинговой шкалы обучающийся может набрать по данной дисциплине за семестр максимально 60 баллов, из них 20 баллов – за практические работы (2 работы по 10 баллов). 20 баллов – за контрольные работы (2 работы по 10 баллов), 20 баллов – защита проекта с презентацией (10 баллов – реферат и 10 баллов - презентация).

Форма итогового контроля - **устный экзамен** (вопросы для подготовки к экзамену).

В соответствии с рейтинговой шкалой от экзамена освобождаются студенты, набравшие в семестре: 45-49 баллов получает 10 бонусных баллов и оценку «удовлетворительно»; 50-55 баллов – 20 бонусных баллов и оценку «хорошо»; 56-60 баллов – 30 бонусных баллов и оценку «отлично».



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

Ответ на экзаменационный билет, который содержит 2 вопроса, оценивается из 40 баллов. Критерии и шкала оценки:

- оценка «отлично» (40 баллов) выставляется студенту, если полностью раскрыто содержание вопросов билета; оценка «хорошо» (30 баллов) выставляется студенту, если один из вопросов раскрыт частично, а другой полностью; оценка «удовлетворительно» (20 баллов) выставляется студенту, если дан полный ответ только на один из предложенных вопросов или имеются существенные неточности в ответах на оба вопроса; оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если ответы на вопросы отсутствуют или даны ошибочные ответы на каждый вопрос.

Типовые варианты вопросов и заданий находятся в приложении 2 к РП в разделе «Фонд оценочных средств».

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин. Физические методы исследования в химии: М., Высшая школа, 2007.
2. Каныгина, О. Н. Физические методы исследования веществ : учебное пособие / О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова, В. Л. Бердинский ; Оренбургский государственный университет. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2014. – 141 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=330539> – Библиогр. в кн. – Текст : электронный.
3. Звеков, А. А. Спектральные методы исследования в химии : учебное пособие : [16+] / А. А. Звеков, В. А. Невоструев, А. В. Каленский ; Кемеровский государственный университет. – Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2015. – 124 с. : схем., табл. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=437497 . – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-8353-1823-0. – Текст : электронный.
4. Спектральные методы исследования органических соединений : учебно-методическое пособие : [16+] / сост. Г. Л. Рыжова, Б. С. Прялкин ; Томский государственный университет, Кафедра органической химии. – Томск : Томский государственный университет, 2014. – 32 с. : схем., табл., ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=445642> – Текст : электронный.

Дополнительная литература:

1. Изотопная масс-спектрометрия легких газообразующих элементов / под ред. В. С. Севастьянова. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011.— 236 с: ил., табл. — (Проблемы аналитической химии; Т. 15). — ISBN 978-5-9221-1344-1.
2. Векшин, Н. Л. Флуоресцентная спектроскопия биополимеров: краткий учебный курс / Н. Л. Векшин. — Пущино: Фотон-век, 2008.— 168 с.— 08-04-07010.
3. А. Холанд. Молекулы и модели: Молекулярная структура элементов главных групп. Пер. с англ. — М.: УРСС: КРАСАНДР, 2011. -384 с.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет» <https://uni.ivanovo.ac.ru>.

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru;

<http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/ebs-universitetskaya-biblioteka>

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/elibnew>



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office, интернет-браузер Yandex Browser.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;
- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, выполнения проектов с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: демонстрационное оборудование (модели, макеты); электронные пособия (презентации), печатные пособия (таблицы, плакаты).



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Нанобиотехнологии)

Автор рабочей программы дисциплины: доц., к.х.н., доц. Наумова И.К.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии 29 августа 2024 г., протокол № 14.

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ / _____

(подпись)