

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Спецпрактикум «Физическая химия»

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Спецпрактикум «Физическая химия»**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по практике, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3.С. Способность использовать методы регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью инструментальных методов физической химии (молекулярная спектроскопия, термический анализ, микроскопия высокого разрешения, методы анализа поверхности и пр.) Владеть: навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента
СПК-2.С. Способность проводить экспериментальные исследования в избранной области физической химии (кинетика и катализ, химическая термодинамика, молекулярная спектроскопия, химия поверхности)	Уметь: готовить образцы для физико-химических исследований в соответствии с поставленной задачей и с учетом специфики изучаемых объектов Уметь: грамотно спланировать физико-химический эксперимент Владеть: навыками проведения экспериментальных исследований в области физической химии
СПК-3.С. Способность использовать серийные и оригинальные установки (приборы, комплексы) для определения физико-химических свойств веществ	Владеть: навыками работы на современном научном оборудовании для определения физико-химических свойств веществ
СПК-5.С. Способность проводить квантовохимические, термодинамические и	Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов

кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы
---	---

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 8 зачетных единицы, всего 288 часов, из которых 198 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (172 часа – практические занятия, 24 часа – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 90 часов составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: курс физической химии, квантовой химии и строения молекул в объеме базовой части.

Уметь: проводить стандартные операции на физических приборах.

Владеть: навыками обработки результатов физико-химических экспериментов

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

аттестации по дисциплине (модулю)		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Кафедраальный спецпрактикум «Физическая химия» Тема 1. Методы термического анализа	63		36		5		41			22
Тема 2. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ	64		36		6		42			22
Тема 3. Спектральные методы	63		36		5		41			22
Тема 4. Химия поверхности	64		36		6		42			22
Лабораторный спецпрактикум	32		28		2		30			2
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	288		172		24	2	198			90

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляются методические разработки к задачам спецпрактикума, презентации с теоретическим материалом. Дополнительные материалы расположены на сайтах

<https://td.chem.msu.ru/study/specialcourses/specprac-ta/>

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Физические методы исследования в химии, Л.В.Вилков, Ю.А, Пентин, Издательство М.: Мир, 2006. — 683 с, ил.

Дополнительная литература

1. Емелина А.Л. Методическая разработка к лабораторному практикуму Термические методы анализа. Москва, 2014
2. Белова Е.В. " Методическая разработка к задаче лабораторного практикума "Термические методы анализа" - Фазовая диаграмма бинарной системы. Москва, 2018
3. Рид С. Дж. Б. Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия в геологии / С. Дж. Б. Рид; пер. с англ. Д. Б. Петрова, И. М. Романенко, В. А. Ревенко. — М.: Техносфера, 2008. — 229 с.
4. Криштал, М. М. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ в примерах практического применения / М. М. Криштал, И. С. Ясников, В. И. Полуниин и др. — М.: Техносфера, 2009. — 208 с.
5. В.М.Сенявин, Е.А.Пазюк, Г.М.Курамшина “Экспериментальные и теоретические методы молекулярной спектроскопии”. Москва 2016.
6. В.М.Сенявин, Е.А.Пазюк, Г.М.Курамшина, А.В.Леванов, О.Я.Исайкина “Задачи спецпрактикума по молекулярной спектроскопии”. Москва 2016.
7. Горелик Л.Б., Захаров А.Н., Китаев Л.Е., Логинов А.Ю., Сеницына О.А., Ющенко В.В. Описание задач спецпрактикума лаборатории кинетики и катализа. Москва, 1988
8. Лопаткин А.А., Петрова Р.С., Щербакова К.Д. Задачи к семинарским занятиям по физической химии. Адсорбция. Москва, 1982

9. Романовский Б.В. Кинетика гетерогенных каталитических реакций: теория и методы исследования. Москва, 2018
10. Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. Основы молекулярной спектроскопии. Москва. Бином, Лаборатория знаний. 2008.
11. Романовский Б.В. Основы катализа. Москва, 2014
12. Полторак О.М., Чухрай Е.С. Спецкурс по ферментативному катализу. Москва, 2002
13. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость. Москва, 1984

Интернет-ресурсы

<https://td.chem.msu.ru/study/specialcourses/specprac-ta/>

<https://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser/>

<http://gaussian.com/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

н.с., к.х.н. Белова Екатерина Васильевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

catrine2@mail.ru 8-495-939-34-33

м.н.с. Дзубан А.В.

в.н.с., д.х.н. Савилов С.В.,

вед. инж. Дворяк С.В.

доц., к.х.н. Сенявин Владимир Маркович, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

senyavin@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-29-50

В.н.с., д.х.н. Курамшина Гульнара Маратовна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

kuramshi@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-29-50

Доц., д.ф.-м.н. Пазюк Елена Александровна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

razyuk@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-28-25

с.н.с., к.х.н. Шония Наталья Константиновна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

adsorbtion@chem.msu.ru, 8-495-939-34-33

д.х.н., в.н.с. Хохлова Татьяна Дмитриевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,

adsorbtion@chem.msu.ru, 8-495-939-34-33

с.н.с., к.х.н. Атякшева Лариса Фёдоровна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, atyaksheva@phys.chem.msu.ru, 8-495-939-20-54

с.н.с., к.х.н. Попов Андрей Геннадиевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, andreygpov@yahoo.com, 8-495-939-20-54

доц., к.х.н. Китаев Леонид Евгеньевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, leonid-kitaev@yandex.ru, 8-495-939-20-54

асс., к.х.н. Касьянов Иван Алексеевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, superintendent@bk.ru, 8-495-939-20-54

н.с., к.х.н. Родионова Людмила Игоревна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, liudmilarodionova@gmail.com, 8-495-939-20-54

м.н.с. Ефимов Андрей Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, andy.v.efimov@gmail.com, 8-495-939-20-54

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Спецпрактикум выполняется в течение двух семестров и состоит из общекафедральной и лабораторной частей.

Перечень общекафедральных задач, выполняемых на приборах ЦКП МГУ:

1. Блок термического анализа систем разной природы
2. Электронная микроскопия и микроанализ
3. Молекулярная спектроскопия
4. Химия поверхности

Пример задач лабораторного спецпрактикума:

1. Определение среднеионных коэффициентов активности хлорида натрия методом потенциометрии с ионоселективными электродами
2. Давление насыщенного пара как метод определения активности растворителя в бинарной системе соль – вода.
3. Электронная микроскопия высокого разрешения
4. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

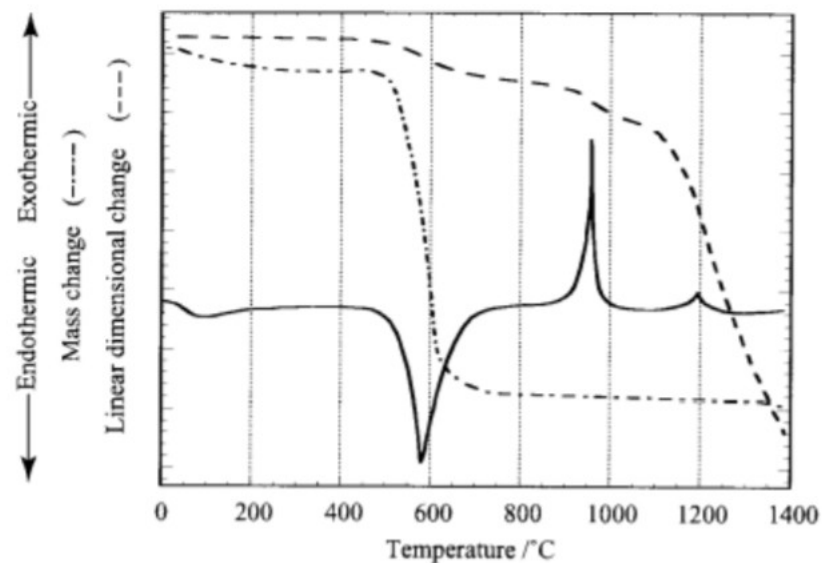
5. Определение параметров пористой структуры адсорбционно-структурным методом.
6. Определение константы диссоциации и активности олигомерных форм ферментов.
7. Дегидрирование пропана в проточной каталитической установке и определение его конверсии.
8. Определение типов и количества кислотных центров катализаторов с помощью ИК спектроскопии адсорбированного пиридина.

Вопросы к зачету:

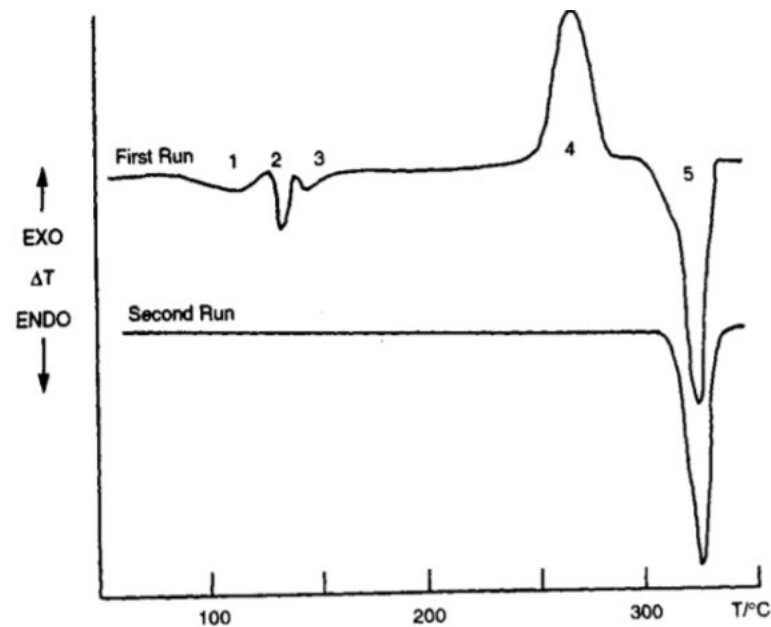
Блок «Термический анализ»

1. В чём суть и какова необходимость процедуры калибровки приборов ДСК и ТГ? Какие способы калибровок по температуре и теплоте используются на практике? Перечислите основные требования к стандартным материалам (reference materials) и аргументируйте их. Почему вода рекомендована в качестве стандарта для калибровки прибора ДСК только по температуре, но не по теплоте?
2. Изобразите схематично сигналы ДСК и ТГ для фазовых переходов I и II рода, процесса стеклования и химической реакции и укажите их важнейшие характеристики. Почему для определения температуры начала пика выбрана процедура определения OnSet?
3. Какова точность определения температуры и теплоты в современных приборах ДСК и СТА? Потери массы в ТГ?
4. В связи с чем конструкция измерительной ячейки прибора ДСК должна быть идеально симметричной?
5. Какие факторы влияют на характер формы кривых ДСК и ТГА? Каким образом? Попробуйте привести примеры.
6. В случае близости температурных диапазонов двух эффектов на ДСК-кривой имеет место наложение сигналов. Например, существует достаточно много химических веществ, разлагающихся в процессе плавления. Возможно, ли каким-либо образом разделить эти процессы и точно измерить температуру и теплоту плавления подобного соединения методом ДСК?
7. Сколько примесей может содержать вещество, чистоту которого пытаются определить методом ДСК? Какие допущения делают при проведении расчётов и насколько они обоснованы?
8. Можно ли и если да, то как увеличить разрешение получаемых ТГ-данных?
9. Каковы особенности проведения ДСК-измерений при очень низких и очень высоких температурах?
10. Какие физические и химические явления можно исследовать с помощью ДТА/ДСК, но не ТГ?
11. Каковы обычные комбинации ТА-методов и какие преимущества они дают по сравнению с отдельными методами?
12. На лекции вы познакомились с тремя приближениями, которые используются для моделирования сигнала ДСК (нулевое, первое и второе). Какое приближение необходимо использовать при моделировании сигнала ДСК при фазовом переходе второго рода? Как вы считаете, возможно ли с помощью метода ДСК определить к какому типу относится фазовый переход (первому или второму роду)?

13. В бинарной системе А-В образуется соединение состава АЗВ. Сделайте набросок фазовой диаграммы этой системы в случае инконгруэнтного и конгруэнтного плавления соединения (АЗВ). Схематично изобразите несколько равновесных кривых ДСК для смесей различного состава. Рассмотрите варианты проведения измерений на нагреве и на охлаждении.
14. Почему прибор ДСК не рекомендуется открывать, когда он охлажден ниже комнатной температуры?
15. Почему необходимо снимать нулевую базовую линию и сигнал ДСК стандарта в тот же день, когда и теплоемкость вещества?
16. Как будет выглядеть ДСК-кривая для капли воды в открытом тигле, тигле с крышкой с дыркой и полностью герметичном тигле для интервала измерения -50 - 150°C?
17. Какие проблемы могут возникнуть при определении кинетики процесса по данным единичного измерения? 18. В вашем распоряжении имеются: синхронный термический анализатор, снабжённый стальной и вольфрамовой печами и термопарами типа S (Pt - Pt/Rh) и К (Cr/Ni - Ni/Al), баллоны с аргоном, аргоном и водородом (90/10), аммиаком, кислородом, синтетическим воздухом и воздухом с примесью угарного газа, тигли из корунда, графита, платины и алюминия. Какие условия вы подберёте для термоанализа следующих образцов: Al, Ni, LiNO₃, CaCO₃, BaF₂, CoSO₄·6H₂O, MgZn₂, ПВХ, пивалат меди, дизельное топливо, каучук, бентонит, альфа-кварц? 19. Перед вами результаты ДТА, ТГ и дилатометрии образцов каолинита Al₂Si₂O₅(OH)₄. Объясните наблюдаемые эффекты.



20. При термоциклировании мелкодисперсных смесей BaCl₂ + KNO₃ в молярном соотношении 1:2 (2°/мин, платиновые тигли) было установлено, что первый и второй нагрев выглядят абсолютно по-разному. Объясните причину этого явления, и дайте характеристику каждому пику на кривой ДСК



Блок «Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ»

1. Какие основные типы электронных микроскопов Вам известны? Как они устроены и для чего применяются?
2. Как формируется электронный пучок в СЭМ? В чем отличия термоэлектронной и автоэлектронной эмиссии?
3. Как электронный пучок взаимодействует с образцом в сканирующем электронном микроскопе? Что такое вторичные и обратно-рассеянные электроны? Какие детекторы применяются для их регистрации?
4. Как правильно подготовить образец для исследования методом СЭМ? Какие требования предъявляются к образцам, подходящим для изучения этим методом?
5. Как формируется изображение в СЭМ? Что вы знаете о механизмах и типах контраста на таких изображениях? На что нужно обращать внимание для правильной интерпретации изображений?
6. Как устроена система электростатических и магнитных линз в электронном микроскопе? Какие дефекты могут возникать при формировании изображения? Что такое хроматические и сферические аберрации, астигматизм?
7. Как влияют на качество картины ускоряющее напряжение, сила тока, размер апертуры, рабочее расстояние, наклон образца?

8. Каковы преимущества и недостатки метода СЭМ по сравнению с металлографическим исследованием при изучении микроструктуры металлов и сплавов?
9. Какие технологии используются для нанесения электропроводящих покрытий на поверхность образца?
10. Каковы особенности электронной микроскопии образцов с развитым рельефом поверхности? Какие модификации метода применяются для изучения таких образцов?
11. Какие модификации метода СЭМ применяются для получения трёхмерных изображений?
12. Что такое керамика? Каково место СЭМ среди методов характеристики керамик? С чем СЭМ лучше комбинировать при комплексном анализе керамического материала?
13. Какова градация уровней вакуума в технике? Какие объекты СЭМ целесообразно изучать в режиме низкого вакуума?
14. Каковы отличия электронного микроскопирования биологических препаратов по сравнению с металлами? Перечислите и охарактеризуйте основные методы пробоподготовки в этом случае.
15. Что называется характеристическим рентгеновским излучением и как оно используется в химическом анализе?
16. Какие задачи может решать рентгеноспектральный микроанализ (РСМА)? Чем по своим возможностям он отличается от других методов анализа?
17. Какие типы регистрации характеристического излучения Вам известны? Какими преимуществами и недостатками обладают различные виды РСМА?
18. Каковы особенности подготовки образцов для исследования методом РСМА? Как повысить интенсивность аналитического сигнала? Как на аналитический сигнал влияют параметры электронного пучка?
19. Каковы особенности качественного и количественного РСМА? Охарактеризуйте этот метод с точки зрения химической метрологии.

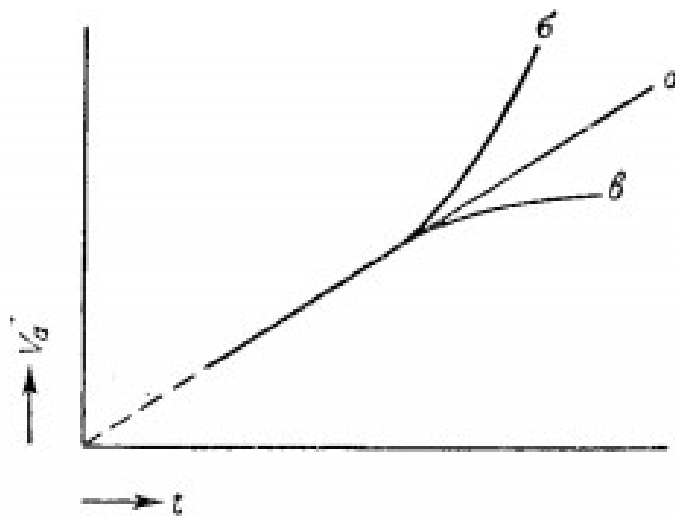
Блок «Спектральные методы»

1. Кратко охарактеризуйте основные экспериментальные методы колебательной спектроскопии.
2. Какие принципы используются при отнесении колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул?
3. Какие молекулярные постоянные можно получить из анализа колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул? Как они связаны с параметрами потенциала Морзе?
4. С чем связано усложнение тонкой структуры в электронных спектрах?
5. Какие данные необходимы для моделирования электронно-колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул? Каковы источники получения этой информации?

6. Как выглядит основное уравнение для расчета нормальных колебаний?
7. Что такое групповые и характеристические частоты колебаний?
8. Чем отличаются перпендикулярные и параллельные колебательные переходы? С чем связано это различие?
9. В чем заключается особенность колебательно-вращательного спектра ацетилена?
10. Покажите возможность определения симметрии молекулы на основе данных ИК- и КР- спектроскопии (на конкретном примере).
11. Какую информацию можно получить из поляризационных спектров КР?
12. Как проявляется взаимодействие Кориолиса в колебательно-вращательном спектре метана?
13. Какая экспериментальная информация необходима для определения констант взаимодействия Кориолиса?
14. Что такое прямая и обратная задачи для расчета колебаний молекул?
15. Определение энергии водородной связи по результатам квантовохимических расчетов и ИК-спектров.

Блок «Химия поверхности»

1. О чём даёт возможность получить представление анализ термодесорбционного спектра?
2. Перечислите основные параметры (не менее 4), определяющие математическую модель термодесорбции, т.е. что качественно влияет на получаемый спектр.
3. Запишите уравнение материального баланса при термодесорбции 1-го порядка в потоке газа-носителя в отсутствие влияния диффузии.
4. Реедсорбция молекул может существенно влиять на получаемый спектр десорбции. Что может служить критерием незначительного влияния реедсорбции?
5. Запишите уравнение Аменомия-Цветановича, объясните параметры, входящие в уравнение, и укажите способ нахождения величин энергии активации десорбции (E_d).
6. Что определяют из уравнения Аменомия-Цветановича вместо параметра E_d в случае существенного влияния реедсорбции?
7. Из ниже приведённого графика определите, что представляют собой участки *a*, *b* и *v*. Что можно сказать о поверхности, форме и ширине пор? Статистическая толщина слоя выражается зависимостью $t \sim V_a/S_{БЭТ}$. V_a – объём адсорбированного газа.



Три основных типа графиков зависимости общего объема адсорбированного вещества от толщины адсорбционного слоя.

8. Как можно определить истинную константу скорости денатурации фермента (на примере термоинактивации β -галактозидазы)?
9. В чём принципиальное различие изучения кинетики ингибирования щелочной фосфатазы в растворе и в адсорбционных слоях?
10. В чём заключается метод Глюкауфа для определения величин адсорбции и равновесных концентраций сорбата из хроматографических данных?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты</p> <p>Уметь: оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы с помощью инструментальных методов физической химии (молекулярная спектроскопия, термический анализ, микроскопия высокого разрешения, методы анализа поверхности и пр.)</p> <p>Уметь: готовить образцы для физико-химических исследований в соответствии с поставленной задачей и с учетом специфики изучаемых объектов</p> <p>Уметь: грамотно спланировать физико-химический эксперимент</p> <p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете и при сдаче задачи</p>
<p>Владеть: навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента</p>	<p>мероприятия текущего контроля</p>

<p>Владеть: навыками проведения экспериментальных исследований в области физической химии</p> <p>Владеть: навыками работы на современном научном оборудовании для определения физико-химических свойств веществ</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы</p>	<p>успеваемости, устный опрос на зачете и при сдаче задачи</p>
---	--