

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д. А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Физические методы в исследовании структуры и динамики молекулярных систем

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) Савинков А.В.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-8	способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности
ПК-1	способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
ПК-2	способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта
ПК-4	способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основы методов и аппаратуру ИК-спектроскопии, рентгенографии и светорассеяния.

Должен уметь:

- уметь работать на ЯМР спектрометре-релаксометре Хроматек 'Протон-20М', самостоятельно проводить расшифровку ИК-спектров и рентгенограмм

Должен владеть:

теоретическими основами и базовыми знаниями в области техники ИК-спектроскопии, рентгенографии и светорассеяния, ЯМР.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- к применению полученных знаний и навыков в практике научных исследований в области структуры и динамики полимерных систем.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.3 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.03.02 "Физика (не предусмотрено)" и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 3 курсе в 5 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 72 часа(ов), в том числе лекции - 36 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 36 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 36 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 5 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. ИК-спектроскопия	5	12	0	12	12
2.	Тема 2. Рентгенография	5	12	0	12	12
3.	Тема 3. Метод ЯМР	5	6	0	6	6
4.	Тема 4. Метод ЯМР-диффузомерии	5	6	0	6	6
<p>4.2 Содержание дисциплины (модуля)</p> <p>Тема 1. ИК-спектроскопия Производство ИК-спектров и их краткая характеристика. Уравнение движения для колебаний многоатомной молекулы. Активность и интенсивность нормальных колебаний. Колебания линейных регулярных макромолекул. Анализ симметрии и активности колебаний молекул полиэтилена. Колебания кристаллических решеток на примере кристаллического полиэтилена.</p>						

Методика ИКС. Устройство и работа спектрометра. ИК-спектрометры с Фурье-преобразованием. Спектры комбинационного рассеяния. Правила отбора. Техника эксперимента.

Тема 2. Рентгенография

Рентгеновские лучи. Источники рентгеновского излучения. Фильтрация и монохроматизация. Оптика рентгеновских аппаратов для широкоугольного и малоугольного рассеяния. Методы регистрации рассеянных лучей. Некоторые сведения из кристаллографии: кристаллическая решетка, элементарная ячейка, индексы плоскостей и узлов. Широугольная рентгенография полимерных кристаллов. Малоугольная рентгенография. Особенности эксперимента. Теория Гинье для разбавленных систем. Определение размера рассеивающих частиц.

Тема 3. Метод ЯМР

Классическое рассмотрение ЯМР. Импульсное возбуждение спиновой системы. Лабораторная и вращающаяся системы координат. Понятия времен спин-спиновой и спин-решеточной релаксации. Простая ядерная двухуровневая система. Спин-спиновая и спин-решеточная ядерная релаксация. Механизмы ядерной магнитной релаксации. Диполь-дипольная ядерная релаксация. Релаксация через парамагнитные центры. Спад свободной индукции (ССИ). Метод Хана и спиновое эхо. Методы измерения времен спин-спиновой релаксации. ССИ, импульсная последовательность Хана, последовательность КРМГ. Методы измерения времен спин-решеточной релаксации. Нуль-метод, последовательность "180-tau-90".

Тема 4. Метод ЯМР-диффузомерии

Самодиффузия: понятие и методы измерения. Постоянный линейный градиент магнитного поля. Возбуждение и формирование сигнала в неоднородном магнитном поле. Времена продольной и поперечной магнитной релаксации в жидкостях, твердых телах и полимерных системах. Методы измерения T1 и T2 коэффициентов самодиффузии. Устройство релаксометров и диффузомеров ЯМР. Методика обработки сложных экспериментальных спадов продольной и поперечной намагниченности.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

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

Инфракрасная спектроскопия - <http://him.1september.ru/article.php?ID=200202101>

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА МАКРОМОЛЕКУЛ -

http://www.impb.ru/pdf/LCM_1994_6r.pdf

ОСНОВЫ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА - http://ssrc.inp.nsk.su/CKP/lectons/X-ray_structure_analysis.pdf

Химическая энциклопедия: ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС -

http://www.chemport.ru/data/chemipedia/article_6533.html

ЯМР для чайников?, или Десять основных фактов о ядерном магнитном резонансе -

<http://trv-science.ru/2013/05/07/yamr-dlya-chajnikov-ili-desyat-osnovnykh-faktov-o-yadernom-magnitnom-rezonanse/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	При подготовке лекционному занятию следует разобрать материал предыдущих лекционных занятий. Студенты могут получить дополнительную информацию по вопросам, вызывающим затруднения, из рекомендованной основной и дополнительной литературы, а также на интернет-ресурсах, кроме того, студенты могут получить дополнительную информацию на индивидуальных консультациях с преподавателем.

Вид работ	Методические рекомендации
лабораторные работы	При подготовке лабораторным работам следует разобрать практические задания, которые были разобраны на семинарских занятиях. Также необходимо разобрать материал лекционных занятий, относящихся к тематике лабораторной работы. Перечень тем лабораторных работ разрабатывается преподавателем, ведущим дисциплину. Задания по лабораторным работам составляются таким образом, что охватывают основные аспекты изучаемой дисциплины.
самостоятельная работа	При подготовке к самостоятельной работе следует повторно разобрать задания, которые были разобраны на семинарских занятиях. Студенты могут получить дополнительную информацию по вопросам, вызывающим затруднения при подготовке к самостоятельной работе, на индивидуальных консультациях с преподавателем. Перечень тем самостоятельных работ разрабатывается преподавателем, ведущим дисциплину. Самостоятельных работы составляются таким образом, что охватывают основные аспекты изучаемой дисциплины. Тематика каждой самостоятельной работы озвучивается преподавателем на семинарском занятии.
экзамен	<ul style="list-style-type: none"> - самостоятельное изучение отдельных тем (вопросов) дисциплины с использованием учебника, первоисточника, дополнительной литературы; - подготовка кратких тезисов и выписок изучаемого материала; - конспектирование наиболее важной информации из учебной и научной литературы по изучаемой теме; - составление таблиц и логических схем для систематизации учебного материала; - использовать ресурсы сети internet для поиска и уточнения дополнительной информации; - заучивание и запоминание, повторение учебного материала и т.д. <p>Студенты могут получить дополнительную информацию по вопросам, вызывающим затруднения при подготовке к экзамену, на индивидуальных консультациях с преподавателем. Перечень вопросов к экзамену разрабатывается преподавателем, ведущим дисциплину. Вопросы к экзамену составляются таким образом, что охватывают основные аспекты изучаемой дисциплины.</p>

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

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;

- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.03.02 "Физика" и профилю подготовки "не предусмотрено".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.3 Физические методы в исследовании структуры и
динамики молекулярных систем

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Основная литература:

1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.И. Васильева [и др.] ; под ред. Селеменова В.Ф., Семенова В.Н. ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2014. ? 416 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>
2. Акулин, В.М. Динамика сложных квантовых систем [Электронный ресурс] : монография / В.М. Акулин ; пер. с англ. Крайнова В.П.. ? Электрон. дан. ? Москва : Физматлит, 2009. ? 489 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/48264>
3. Федотов, М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости [Электронный ресурс] : монография / М.А. Федотов. ? Электрон. дан. ? Москва : Физматлит, 2010. ? 384 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2151>

Дополнительная литература:

1. Боровик, Е.С. Лекции по магнетизму [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е.С. Боровик, В.В. Еременко, А.С. Мильнер. ? Электрон. дан. ? Москва : Физматлит, 2005. ? 512 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2118>
2. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ [Электронный ресурс]: учебное пособие / Г.В. Фетисов. - Электрон. дан. - Москва: Физматлит, 2007. - 672 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2152>
3. Вшивков, С.А. Фазовые переходы полимерных систем во внешних полях [Электронный ресурс] : учебное пособие / С.А. Вшивков. ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2013. ? 368 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/30431>

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.3 Физические методы в исследовании структуры и
динамики молекулярных систем

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.03.02 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.