

Федеральное государственное учреждение
«Федеральный научно-исследовательский центр
«Кристаллография и фотоника»
Российской академии наук»

Принято на Ученом совете ЦФ РАН
Протокол № 2 от 08.04.2020 г.



«Утверждаю»
Директор



О.А. Алексеева

« 08 » апреля 2020 г.

**Рабочая программа дисциплины
" Физическая химия "**

Направление подготовки
04.06.01. ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ
Направленность (профиль) подготовки
«Физическая химия» (02.00.04)

Квалификация (степень) выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения очная

Москва 2020

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной образовательной программы

КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Физическая химия» направлено на формирование следующих общекультурных и профессиональных компетенций аспиранта:

Код компетенции	Результаты освоения ООП <i>Содержание компетенций</i>	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
УК-4	Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	знать: -виды и особенности письменных текстов и устных выступлений; понимать общее содержание сложных текстов на абстрактные и конкретные темы, в том числе узкоспециальные тексты - стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме при работе в российских и международных исследовательских коллективах уметь: - подбирать литературу по теме научно-исследовательской работе, составлять двуязычный словник - переводить и реферировать специальную научную литературу -подготавливать научные доклады и презентации на базе прочитанной специальной литературы, объяснять свою точку зрения и рассказать о своих планах владеть: -навыками обсуждения знакомой темы, делая важные замечания и отвечая на вопросы -навыками создания простого связного текста по знакомым или интересующим его темам, адаптируя его целевой аудитории

ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно- исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно- коммуникационных технологий	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - способы анализа имеющейся информации - методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий - сущность информационных технологий <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - ставить задачу и выполнять научные исследования при решении конкретных задач по направлению подготовки с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств - применять теоретические знания по методам сбора, хранения, обработки и передачи информации с использованием современных компьютерных технологий <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами самостоятельного анализа имеющейся информации -практическими навыками и знаниями
ПК-3	владение современными методами физико-химического исследования органических веществ, средствами планирования и организации исследований, проведения экспериментов, выдвижения гипотез и установления границ их применения	<p>Знать: физико-химические методы, которые могут применяться для исследования органических веществ.</p> <p>Уметь: планировать физико-химические исследования и эксперименты в области фотохимии органических соединений.</p> <p>Владеть: современными методами физико-химического исследования органических соединений</p>
ПК-4	умение проводить инновационные физико-химические исследования, включая критический анализ данных из мировых информационных ресурсов, сложный эксперимент, формулировку выводов в условиях неоднозначности с применением глубоких профессиональных знаний	<p>Знать: современные возможности исследования фотофизических свойств сложных органических и неорганических соединений, супрамолекулярных систем и наноструктурированных материалов</p> <p>Уметь: проводить инновационные фотофизические и фотохимические исследования и сложные эксперименты, формулировать выводы.</p>
ПК-5	умение применять основные законы физической химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	<p>Знать: основные законы физической химии,</p> <p>Уметь: использовать основные законы физической химии для описания строения и свойств веществ, результатов химических экспериментов.</p> <p>Владеть: навыками применения основных законов химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных</p>

В результате освоения дисциплины «Физическая химия», обучающийся должен:

1. Знать:

- место и роль экспериментальных методов в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области оптической спектроскопии;
- основные методы оценки ошибок измерения;
- основные методы измерения стационарных и время-разрешенных характеристик электромагнитного излучения в оптическом диапазоне;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

2. Уметь:

- пользоваться литературой по спектроскопическим методам для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- правильно выбирать экспериментальные методы в соответствии с поставленной задачей по динамике и структуре физико-химических систем;
- получать наилучшие значения измеряемых величин и правильно оценить степень их достоверности;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;

3. Владеть:

- терминологией оптической спектроскопии;
- методами моделирования быстропротекающих процессов в физико-химических системах;
- научной картиной мира.

2. Место дисциплины в структуре программы подготовки аспиранта

Дисциплина изучается на 2 курсе.

Целью курса является изучение основ оптико-спектроскопических измерений. Задачами изучения дисциплины являются закрепление знаний аспирантов по теоретическим основам изучаемых методов, знакомство с возможностями и ограничениями методов и овладение практическими навыками исследования органических соединений физико-химическими методами:

- Освоение студентами знаний в области стационарной и время-разрешенной оптической спектроскопии.
- Изучение общей схемы измерительного устройства и его основные характеристики.
- Приобретение навыков оценки ошибок измерений (в том числе критерий хи-квадрат).
- Изучение метода счета коррелированных фотонов и модуляционно-фазового метода определения динамических характеристик флуоресценции.

Для изучения дисциплины необходимы знания, сформированные у аспирантов в результате освоения дисциплин базовой части (общепрофессиональные дисциплины) и образовательных программ магистратуры и специалитета по направлению «Химия»:

-Неорганическая химия (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов, навыки описания свойств веществ на основе закономерностей, вытекающих из периодического закона и Периодической системы элементов);

-Органическая химия (владение теоретическими представлениями органической химии, знаниями о составе, строении и свойствах органических веществ - представителей основных классов биологически активных соединений);

-Квантовая механика и квантовая химия (представление о механизмах образования химической связи, строении и спектральных свойствах атомов и молекул);

-Оптика (представление о природе и характеристиках света, его источниках, взаимодействии его с веществом, знакомство с простейшими оптическими приборами);

-Физические методы исследования (знание принципов и областей использования основных физических методов исследования и анализа веществ).

Дисциплина является основной в программе курса подготовки к сдаче кандидатского экзамена на 3 году обучения.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц (з.е.), 180 академических часов.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Объем дисциплины	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	180
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего):	76
Лекции	54
Научно-практические занятия	22
Самостоятельная работа (всего):	104
Индивидуальная работа обучающихся с литературой, интернет-ресурсами	104
Научно-исследовательская работа	
Групповая, индивидуальная консультация	
Творческая работа (рефераты)	
Вид промежуточной аттестации	зачет
Вид итоговой аттестации	экзамен

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

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

очная форма обучения

№ темы	Наименование разделов, тем дисциплины	Часы			
		Всего	Лекции	Практ. занятия	СР

1	Ошибки измерения – грубые (промахи), систематические, случайные.	12	2	0	10
2	Измерительные устройства – общая схема и их передаточные характеристики.	12	2	0	10
3	Измерение аналоговых сигналов.	22	2	8	12
4	Модуляционная техника измерений. Синхронное детектирование.	12	2	0	10
5	Методы счета одиночных фотонов: статистика Пуассона. Метод счета одиночных коррелированных фотонов.	22	2	8	12
6	Датчики. Фотоэлектронный умножитель (ФЭУ).	12	2	0	10
7	Модуляционно-фазовый метод определения времен жизни люминесценции.	20	2	8	10
8	Явление поляризации света и ее характеристики.	22	2	8	12
	Зачет	10	-	-	-
	Экзамен	36	-	-	-
Итого		180	16	32	86

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1	Ошибки измерения: грубые (промахи), систематические, случайные.	.
	<i>Содержание лекционного курса</i>	
		Введение. Физическая и химическая методология. Ошибки измерения – грубые (промахи), систематические, случайные. Статистическая гипотеза. Распределения Гаусса (нормальное). Математическое ожидание и дисперсия. Выборочное среднее и выборочная дисперсия. Среднеквадратичная ошибка среднего. Критерий χ^2 . Сглаживание (регрессия).
2	Измерительные устройства – общая схема и их передаточные характеристики.	
	<i>Содержание лекционного курса</i>	
		Измерительные устройства – общая схема, «черный ящик»:

		датчик, усилитель преобразователь, устройство вывода. Передаточные характеристики. Линейный режим. Нелинейный режим. Динамические свойства. Недемпфированный режим. Передемпфированный режим. Время отклика. Функция Хэвисайда, «ступенька». Функция Дирака. Периодический сигнал. Частотная характеристика. Обратная связь (улучшение стабильности, линейности системы).
3	Измерение аналоговых сигналов.	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Аналоговый сигнал, квадрат амплитуды – энергия сигнала. Отношение сигнала к шуму (по мощности). Предел чувствительности ($c/\text{ш}=1$). Метод усреднения. Интегрирование аналогового сигнала (фильтр НЧ). Примеры спектральной плотности шумов (фликкер шум). Дробовой шум (формула Шотки).
4	Модуляционная техника измерений. Синхронное детектирование.	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Синхронное детектирование. Модуляционная техника измерений. Датчики. Вакуумный фотоэлемент: фотоэффект, спектральная чувствительность, линейность, полоса частот. Темновой ток. Формула Ричардсона. Охлаждение фотокатода – холодильник Пельтье. Полупроводниковый фотоэлемент: p-n переход, фотодиод и светодиод. Фотоэлектронный умножитель (ФЭУ). ФЭУ с микроканальным умножением электронов.
5	Методы счета одиночных фотонов: статистика Пуассона. Метод счета одиночных коррелированных фотонов.	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Спектрофотометрия. Закон Ламберта – Бэра. Спектрофотометр – типичная оптическая схема, принцип работы. Спектрофлуориметрия. Виды люминесценции - флуоресценция, фосфоресценция, замедленная флуоресценция. Методы измерения спектров флуоресценции и фосфоресценции, спектров возбуждения люминесценции. Исправление спектров люминесценции. Спектрофлуориметр - оптическая схема, принцип работы.
6	Датчики. Фотоэлектронный умножитель (ФЭУ).	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Метод счета одиночных коррелированных фотонов. Импульсные источники света. Амплитудный дискриминатор. Время-амплитудный преобразователь. Многоканальный амплитудный преобразователь. Связь между распределением по временам задержки отклика системы на импульсное возбуждение и зависи-

		мости интенсивности флуоресценции от времени. Отклик на возбуждение нулевого протяжения, но конечной энергии (функция Дирака). Свертка, обращение свертки (деконволюция). Представление затухания флуоресценции в виде суммы экспонент (физ. смысл такого представления).
7	Модуляционно-фазовый метод определения времен жизни люминесценции.	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Модуляционно-фазовый метод определения времен жизни. Основные формулы для мономолекулярного распада. Коэффициент модуляции и сдвиг фазы как функция частоты модуляции. Исторические замечания. Основные формулы для общего случая мультиэкспоненциального затухания флуоресценции. Источники возбуждения флуоресценции. Методы модуляции (ячейка По-кельса).
8	Явление поляризации света и ее характеристики.	
<i>Содержание лекционного курса</i>		
		Явление поляризации света. Деполяризация флуоресценции. Поляризатор. Линейная, циркулярная (круговая) поляризации. Поляризационное отношение, степень поляризации, анизотропия поляризации. Зависимость анизотропии поляризации от времени.

5. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции (или её части) / и ее формулировка – по желанию	Наименование оценочного средства
1	Ошибки измерения – грубые (промахи), систематические, случайные.	ОПК-1	Зачет
2	Измерительные устройства – общая схема и их передаточные характеристики.	ПК-3 ПК-4	
3	Измерение аналоговых сигналов.	ПК-5	
4	Модуляционная техника измерений. Синхронное детектирование.		
5	Методы счета одиночных фотонов: статистика Пуассона. Метод счета одиночных коррелированных фотонов.		
6	Датчики. Фотоэлектронный умножитель (ФЭУ).		
7	Модуляционно-фазовый метод опреде-		

	ления времен жизни люминесценции.		
8	Явление поляризации света и ее характеристики.		

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы

Перечень контрольных вопросов для сдачи зачета:

1. Основные характеристики случайных процессов.
2. Критерий χ^2 . Сглаживание (регрессия).
3. Функция корреляции как критерий случайности
4. Частотная характеристика.
5. Обратная связь (улучшение стабильности, линейности системы).
6. Примеры спектральной плотности шумов (фликкер шум).
7. Дробовой шум (формула Шотки).
8. Естественные пределы измерений физических величин. Тепловой шум.
9. Гальванометр. Измерение тока счетом отдельных электронов.
10. Вакуумный фотоэлемент: фотоэффект, спектральная чувствительность, линейность, полоса частот.
11. Темновой ток. Формула Ричардсона.
12. ФЭУ с микроканальным умножением электронов.
13. Диаграмма Яблонского.
14. Определение времени жизни флуоресценции.
15. Свертка, обращение свертки (деконволюция).
16. Представление затухания флуоресценции в виде суммы экспонент (физ. смысл такого представления).
17. Кинетическая модель двух флуоресцирующих состояний, связанных между собой. Метод квазистационарных состояний.
18. Коэффициент модуляции и сдвиг фазы как функция частоты модуляции.
19. Источники возбуждения флуоресценции.
20. Поляризационное отношение, степень поляризации, анизотропия поляризации.
21. Зависимость анизотропии поляризации от времени.
22. Вывод формулы Левшина-Перрена.

5.2 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

Для контроля усвоения данной дисциплины учебным планом предусмотрена сдача зачета. Аспирант считается допущенным к сдаче зачета при условии выполнения им плана учебных занятий. На зачете обучающимся предлагается ответить на два теоретических вопроса по материалам учебной дисциплины.

При проведении зачета ответ считается зачтенным в случае более 50 % правильных ответов на теоретические вопросы. Ответ считается не зачтенным, если материал усвоен аспирантом менее, чем на 50%.

Для получения более глубоких и устойчивых знаний аспирантам рекомендуется изучать дополнительную литературу, список которой приведен в п. 7 рабочей программы по дисциплине.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: поисковые сайты, базы данных химических соединений, электронные библиотеки (п. 7).

6. Перечень основной и дополнительной литературы (учебной и научной), необходимой для освоения дисциплины

Основная литература.

1. Экспериментальные методы химии высоких энергий. Под ред. М.Я. Мельникова - Москва: МГУ, 2009
2. Стромберг, А.Г., Семченко, Д.П. Физическая химия - Москва: изд. Высшая школа, 1999.
3. Рабек Я. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике. В двух томах. - Москва: Мир, 1985
4. Калверт, Дж., Питтс, Дж. Фотохимия. - Москва: Мир, 1968

Дополнительная литература.

1. Марпл-мл, С.Л. Цифровой спектральный анализ и его применение - Москва: изд. Мир, 1990
2. Руководство по экспериментальным методам исследований при разработке и экспертизе лекарственных препаратов - под ред. С.Н. Быковского, Москва: изд. Перо, 2014
3. Электронная спектроскопия. под ред. И.Б. Боровского - Москва: Мир, 1971
4. Балтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. - Москва: Мир, 1978

Периодические издания, электронные ресурсы, включая доступ к базам данных и т.д.:

РИНЦ	https://elibrary.ru/orgs.asp
Web of Science	http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=General-Search&SID=F2LiEv3BvmxwoCqmOmV&preferencesSaved=
Scopus	https://www.scopus.com/home.uri
Google Scholar citations	https://scholar.google.ru/citations?user=NbJEoV8A-AAAJ&hl=ru
IOP Institute of Physics материалы компании IOP Publishing Limited, а именно, база данных IOP Journal	http://www.iop.org/
AIP материалы компании American Institute of Physics	https://www.aip.org/
CASC материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных CASC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases
APS Журналы Американского физического общества база данных APS Online Journals	https://www.aps.org/
IEEE материалы компании The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc, а именно, база данных	http://ieeexplore.ieee.org/Xplore/home.jsp

IEEE/IEL	
RSC материалы Royal Society of Chemistry	http://pubs.rsc.org/
Wiley материалы компании John Wiley & Sons Ltd., а именно база данных Wiley Journals	http://onlinelibrary.wiley.com/
Inspec материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных INSPEC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases/inspec
ProQuest материалы компании и PROQUEST LLC, а именно база данных Proquest Dissertations and Theses Global	https://www.proquest.com/products-services/pqdtglobal.html
SpringerNature Зарубежные электронные ресурсы издательства, а именно: Springer Journals Springer Protocols Springer Materials Springer Reference zbMATH Nature Journals Nano Database	http://link.springer.com/ http://www.springerprotocols.com/ http://materials.springer.com/ http://link.springer.com/search?facet-content-type=%22ReferenceWork%22 http://zbmath.org/ http://npg.com/ https://nano.nature.com
Elsevier B.V. Science Direct Complete Freedom Collection зарубежные электронные ресурсы издательства Elsevier «Freedom Collection» и коллекция электронных книг «Freedom Collection eBook collection», размещенных на платформе Science Direct	https://www.elsevier.com/
CCDC - Cambridge Crystallographic Data Centre Зарубежные электронные ресурсы Кембриджского центра структурных данных	https://www.ccdc.cam.ac.uk/
Scifinder База данных	https://scifinder.cas.org

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

вид учебных занятий	организация деятельности обучающегося
---------------------	---------------------------------------

Лекция	Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии.
Научно-практические занятия	Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, работа с текстом. Прослушивание аудио- и видеозаписей по заданной теме, решение расчетно-графических заданий, решение задач по алгоритму и др.
Самостоятельная работа/индивидуальные задания	Знакомство с основной и дополнительной литературой, включая справочные издания, зарубежные источники, конспект и т.д. Составление аннотаций к прочитанным литературным источникам и др. Работа по написанию раздела главы научно-исследовательской работы.
Реферат	Краткое изложение в письменном виде содержания научных трудов, литературы по предложенной научной теме.
Подготовка к экзамену (зачету)	При подготовке к экзамену (зачету) необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

1. Консультирование посредством электронной почты.
2. Интерактивное общение с помощью Skype.
3. Использование слайд-презентаций при проведении лекционных занятий.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. **Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:** аудитория, стандартной доской для рисования мелом, компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система)
2. **Обеспечение самостоятельной работы - базы данных научных журналов** <http://www.springerlink.com>. <http://pubs.acs.org>.