

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
А.С. Князев

«26» августа 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы исследования функциональных материалов

специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.1.ДВ.01.05.05

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов комплексного подхода к изучению состава и структуры функциональных материалов, закономерностей их формирования, получение студентами знаний о теоретических основах современных физико-химических методах, имеющих наиболее широкую область применения в данной области, а также формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

– ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.

ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить понятийный аппарат и основные принципы современных физико-химических методов, используемых для исследования материалов;

– Освоить возможности и ограничения физико-химических методов, особенности пробоподготовки объектов к исследованиям;

– Приобрести навыки работы с научной литературой, обработкой и представлением экспериментальных данных;

– Научиться разрабатывать детальный и комплексный план исследований состава и структуры функциональных материалов;

– Научиться анализировать и интерпретировать экспериментальные данные по составу и структуре функциональных материалов по данным различных физико-химических методов.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Физическая химия.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 8, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Коллоидная химия», «Строение вещества», «Адсорбционные процессы», «Методы приготовления и исследования катализаторов».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

- лекции: 32 ч.;
- семинарские занятия: 0 ч.
- практические занятия: 32 ч.;
- лабораторные работы: 0 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Обзор современных методов исследования функциональных материалов.

Введение. Основные понятия. Классификация функциональных материалов составу, структуре, функциональным свойствам. Физические свойства и диагностика материалов. Классификация методов анализа и их применение.

Тема 2. Фазовый анализ, рентгенофазовый анализ.

Основы дифракции рентгеновских лучей. Рентгеновское излучение. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Общий вид дифрактограммы. Качественный рентгенофазовый анализ (РФА). Базы данных. Дифракционный эксперимент: оборудование, пробоподготовка, условия съемки. Теоретическая дифрактограмма. Уточнение кристаллических структур. Метод Ритвельда.

Тема 3. Рентгеновское малоугловое рассеяние.

Малоугловое рассеяние. Теоретические основы метода. Оборудование, пробоподготовка, условия съемки. Определение формы частиц. Радиус Гинье. Распределение частиц по размерам. Примеры применения метода малоуглового рассеяния в исследовании наноматериалов.

Тема 4. Электронная и колебательная спектроскопия.

Основные принципы методов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), оже-электронной спектроскопии, рентгеновского флуоресцентного анализа (РФЛА), спектроскопии диффузного отражения (СДО), спектроскопии комбинационного рассеяния (КР, Раман). Интерпретация рентгеновских фотоэлектронных спектров, «химический сдвиг», качественный и количественный анализ методом РФЭС, ограничения метода. Оже-электронная спектроскопия: физические принципы,

аналитические возможности, интерпретация спектров. Физические основы и аналитические возможности методов рентгеновского флуоресцентного анализа и электронного микроанализа. УФ-видимая электронная спектроскопия: физические принципы, интерпретация спектров, возможности и ограничения. Спектроскопия комбинационного рассеяния: физические принципы, интерпретация спектров. Аппаратура для реализации методов. Примеры применения методов электронной и колебательной спектроскопии в исследовании наноматериалов.

Тема 5. Исследование морфологии поверхности методами STM и AFM

Общий принцип сканирующей зондовой микроскопии и режимы работы. Особенности пробоподготовки и изучение морфологии поверхности методами сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии. Исследование морфологии поверхности каталитических систем. Обработка экспериментальных данных.

Тема 6. Микроскопические методы анализа структуры материалов: SEM, TEM

Просвечивающая электронная микроскопия. Подготовка образцов. Устройство просвечивающего электронного микроскопа. Увеличение, глубина резкости, контраст и разрешение. Режимы светлого и тёмного поля. Примеры изображений и их интерпретация.

Растровая (сканирующая) электронная микроскопия. Подготовка образцов. Устройство микроскопа. Методы формирования изображения. Увеличение и разрешение. Примеры изображений и их интерпретация.

Тема 7. Термический анализ: общие сведения

Классификация методов термического анализа и их применение. Приборы и аппаратное оформление методов. Устройство термоанализаторов. Синхронный термический анализ. Планирование эксперимента. Факторы, влияющие на результаты термического анализа.

Тема 8. Применение термогравиметрии в исследовании веществ, катализаторов и сорбентов

Области применения методов термического анализа: построение фазовых диаграмм, определение температуры плавления, определение чистоты вещества, теплоемкости оксидов, степени кристалличности, состава вещества по данным термического анализа. Неизотермическая кинетика в термическом анализе.

Тема 9. Метод температурно-программированной десорбции

Метод температурно-программированной десорбции. Основные понятия и определения: десорбция, активные центры поверхности, степень заполнения поверхности, энергия активации десорбции. Кинетика десорбции: уравнение Вигнера-Поляни. Экспериментальные методы определения порядка, энергии активации десорбции и частотного фактора: влияние скорости нагрева образца на положение максимума десорбционного пика, метод одновременно определения кинетических параметров десорбции по одному десорбционному пику, ступенчатая десорбция. Кислотно-основные центры твердых тел. Применение неизотермических методов для оценки кислотно-основных центров твердых тел. Определение дисперсности металлических частиц по данным сорбционных экспериментов. Оформление экспериментальной установки (анализ схем, приводимых в литературе, сопоставление вакуумных и проточных термодесорбционных систем).

Тема 10. Температурно-программированное окисление/восстановление

Температурно-программированное окисление и температурно-программированное восстановление. Термодинамика, кинетика и механизм восстановления. Теория неизотермического восстановления и влияние параметров эксперимента. Особенности реализации методов ТПО и ТПВ.

Тема 11. Температурно-программированная реакция. Метод импульса.

Температурно-программированная реакция. Экспериментальные особенности метода и примеры применения. Теоретические основы импульсного метода. Особенности

протекания каталитических реакций в импульсном режиме. Исследования механизмов каталитических реакций: спектроскопия *in-situ* и *Operando*.

Тема 12. Аппаратурное оформление хемосорбционных методов.

Хемосорбционные анализаторы ChemiSorb 2750 и AutoChem, их использование при изучении состава и свойств поверхности функциональных материалов, а также для проведения исследований в режиме ТПО-ТПВ. Масс-спектрометрическое детектирование продуктов превращения в режиме ТПР.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, степени участия в практических занятиях, выполнения домашних заданий по теме дисциплины и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается экзаменом, допуском к которому является успешное выполнение заданий текущего контроля.

Экзамен проводится в виде устной защиты доклада по теме выбранного студентом индивидуального задания, оформленного в виде презентации и пояснительной записки. На защите доклада оценивается полнота раскрытия темы, использование понятийного аппарата, умение вести научную дискуссию и отвечать на вопросы аудитории.

Примерный перечень тем для научных докладов:

1. Исследование объектов моей дипломной работы рентгеновскими методами.
2. Исследование морфологии поверхности объектов моей дипломной работы методами SEM и TEM/ STM и AFM.
3. Исследование химического состава поверхности объектов моей дипломной работы.
4. Определение кислотных центров Al_2O_3 методами неизотермической кинетики.
5. Определение дисперсности частиц активного компонента катализаторов (Pd, Ag и др.).
6. Определение кинетических параметров температурно-программированного восстановления оксидной фазы нанесенного катализатора.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

«Отлично» – представленный доклад выполнен в соответствии с поставленными целями и задачами. Студент четко изложил материал с обоснованием полученных результатов. Ответы на вопросы даны в полном объеме и аргументированы. Студент показал отличную подготовку и эрудицию по пройденным темам, грамотно использует научную лексику.

«Хорошо» – представленный доклад выполнен в соответствии с поставленными целями и задачами. Имеют место несущественные отклонения от требований. Представление научного доклада проведено грамотно, имеют место неточности в изложении. Ответы на отдельные вопросы даны не в полном объеме. Грамотно использует научную лексику. Студент показал хорошую подготовку и эрудицию по пройденным темам.

«Удовлетворительно» – представленный доклад в целом соответствуют поставленным целями и задачами. Имеют место недочеты в изложении материала. На некоторые вопросы не даны ответы. Научная лексика используется ограниченно. Наблюдается сильная степень неуверенности. Показана достаточная подготовка по пройденным темам.

«Неудовлетворительно» - представленный доклад не может раскрыть поставленные цели и задачи. Научный доклад представлен на низком уровне. На большинство вопросов даны неубедительные ответы. Преобладает бытовая лексика. Показана недостаточная подготовка по пройденным темам.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23528>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии: [учебник для студентов вузов, обучающихся по специальности 011000 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия"] / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. – М. : Мир [и др.], 2003. – 683 с.: – (Методы в химии) . URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000208638/000208638.pdf>.

– Ковба Л. М. Рентгенофазовый анализ / Л. М. Ковба, В. К. Трунов. - 2-е изд., доп. и перераб.. - М. : Издательство Московского университета, 1976. – 231 с.

– Брандон Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля: [учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки "Прикладные математика и физика"] / Д. Брандон, У. Каплан; пер. с англ. под ред. С. Л. Баженова, с доп. О. В. Егоровой. – М.: Техносфера, 2004. – 377 с.

– Чоркендорф И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина – Долгопрудный : Интеллект, 2010. – 500 с.

– Ролдугин В. И. Физикохимия поверхности / В. И. Ролдугин. – Долгопрудный: Интеллект, 2011. – 565 с.

– Карнаухова А. П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов / А. П. Карнаухова. – Новосибирск : Наука, Сиб. Предприятие РАН, 1999. – 470 с. – URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000343275/000343275.pdf>.

– Крылов О. В. Гетерогенный катализ / О. В. Крылов. – М. : Академкнига, 2004. – 679 с.

– Новоженев В. А. Термический анализ: Учебник и практикум для вузов / Новоженев В. А., Стручева Н. Е. – М. : Юрайт, 2022. – 440 с. URL: <https://urait.ru/bcode/496372>. URL: <https://urait.ru/book/cover/5F89AF2F-7893-466C-AD45-61975AD06052>.

– Новоженев В. А. Термический анализ : учебное пособие / В. А. Новоженев, Н. Е. Стручева ; Алтайский гос. ун-т. – Барнаул : Издательство Алтайского государственного университета, 2012. – 382 с.

б) дополнительная литература:

– Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы: [Учебник для химических специальностей вузов] / Л. В. Вилков, Ю. А. Пентин. – М. : Высшая школа, 1989. – 287, [1] с.: ил.. URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000099207/000099207.pdf>

– Characterization of solid materials and heterogeneous catalysts-From structure to surface reactivity. Vol.1 and Vol.2 / Ed. M. Che and J.C. Vedrine – Wiley-VCH Verlag GMBH & Co. KGaA, 2012. – 1181 p.

– Atomic Structure Prediction of Nanostructures, Clusters and Surfaces. / Ed. C.V Ciobanu, C.-Z. Wang, K.-M. Ho – Wiley-VCH Verlag GMBH & Co. KGaA, 2013. – 195 p.

– Суздаев И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П. Суздаев. – М.: Комкнига, 2006. – 529 с.

– Weckhuysen B. M., ed. In-situ spectroscopy of catalysts. // American Scientific Publishers Stevenson Ranch, CA. 2004. [ISBN 978-1-58883-026-5](https://doi.org/10.1016/B978-1-58883-026-5). URL:http://dspace.library.uu.nl/bitstream/handle/1874/23445/weckhuysen_04_in_situspectroscopyofcatalysts.pdf.

– Фиалко М. Б. Неизотермическая кинетика в термическом анализе. - Томск : Издательство Томского университета, 1981. – 110 с.

– Топор Н. Д. Термический анализ минералов и неорганических соединений / Н. Д. Топор, Л. П. Огородова, Л. В. Мельчакова. – М. : Издательство Московского государственного университета, 1987. – 187 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000. – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>;

– SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>;

– ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>;

– Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. l. : s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/>.

– Информационно-аналитическая платформа компании Clarivate Analytics – <https://www.webofscience.com>.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

- <https://webbook.nist.gov/chemistry/> – справочная база данных NIST;
- https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi – спектральная база данных органических соединений

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Лаборатории, оснащенные следующим оборудованием:

- рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD-7000 (Japan);
- УФ-Вид спектрометр Evolution 600 (ThermoScientific, USA);
- хемосорбционный анализатор «AutoChem 2950» (Micromeritics, USA);
- синхронный термический анализатор STA 449F1 (NETZSCH, Германия).

15. Информация о разработчиках

Дорофеева Наталия Валерьевна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Грабченко Мария Владимировна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.