Приложение 4

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИЦМиМ
_____ В.Н. Баранов
подпись инициалы, фамилия
«1» января 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина Методы структурного анализа

Группа научных специальностей 1.4 Химические науки

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями

Группа научных специальностей /научная специальность
1.4 Химические науки /1.4.4 Физическая химия
шифр и наименование

Программу составили Денисов В. М., Чумилина Л.Г.

Заведующий кафедрой (разработчик) Денисова Л. Т._____

«____»_____2022 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры физической и неорганической химии (выпускающая) _____
_____
«____» _____ 2022 г. протокол № _____

Заведующий кафедрой (выпускающей) Денисова Л. Т._____
Дополнения и изменения в учебной программе на 20 __/20__ учебный год.
В рабочую программу вносятся следующие изменения: _____
_____
Рабочая программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры на заседании кафедры физической и неорганической химии «____» _____ 20___г. протокол № _____

Заведующий кафедрой Денисова Л. Т._____

Внесенные изменения утверждаю:
Директор института цветных
металлов и материаловедения Баранов В.Н_____

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины.

Основной целью дисциплины «Методы структурного анализа веществ» является ознакомление аспирантов с современными методами исследования вещества для установления и уточнения его структуры. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о возможностях каждого из методов структурного анализа. Кроме того, после освоения дисциплины аспиранты должны уметь обоснованно выбирать метод или совокупность методов структурного анализа для установления или уточнения структурных данных исследуемого вещества.

1.2 Задачи изучения дисциплины.

1) Формирование у аспирантов понимания принципа работы и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований;

2) знание базовых основ методов структурного анализа органических и неорганических материалов;

3) умение обоснованно и аргументировано осуществлять выбор метода структурного анализа для осуществления научно-исследовательской работы.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения программы аспирантуры.

В результате освоения дисциплины аспирант должен знать:

1) методологию проведения структурного анализа вещества;

2) режимы и условия проведения структурного анализа вещества;

3) способы обработки и анализа результатов структурного исследования вещества

4) методы и способы представления результатов научного исследования

Аспирант должен обладать следующими умениями:

1) правильно выбирать необходимый метод структурного анализа вещества для получения необходимой информации и компилировать и анализировать его результаты

2) правильно разрабатывать методологию проведения структурного анализа для конкретных веществ и материалов;

и владеть навыками:

1) пробоподготовки образцов для осуществления структурного анализа вещества;

2) навыками работы на современном нучно-исследовательском оборудовании структурного анализа вещества;

3) навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач.

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре программы аспирантуры.

Дисциплина «Методы структурного анализа веществ» является факультативной дисциплиной образовательного компонента учебного плана

аспиранта и теоретико-практической базой для проведения научного исследования и написания кандидатской диссертации.

1.5 Особенности реализации дисциплины.
Дисциплина реализуется на русском языке, без применения ЭО и ДОТ.

2 Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад. часов)	Семестр
		1
Общая трудоемкость дисциплины	1 (36)	1 (36)
Контактная работа с преподавателем:	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия лекционного типа		
занятия семинарского типа	0,5 (18)	0,5 (18)
в том числе: семинары практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
другие виды контактной работы		
Самостоятельная работа аспирантов:	0,5 (18)	0,5 (18)
изучение теоретического курса (ТО)		
Вид промежуточной аттестации (зачет)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий).

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад.час)	Занятия семинарского типа (Семинары и/или Практические занятия (акад.час))	Самостоятельная работа, (акад.час),
1	2	3	4	5
1	Модуль 1. Раздел 1 Общие подходы в структурном анализе вещества		3	4
2	Раздел 2. Дифракционные методы анализа		7	7
3	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры вещества.		8	7

3.2 Занятия лекционного типа.
Учебным планом не предусмотрены.

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий[1]	Объем в акад. часах	
			всего	в том числе в инновационной форме
1	Модуль 1. Раздел 1. Общие подходы в структурном анализе вещества	Общие подходы в структурном анализе вещества. Структура вещества. Взаимосвязь структуры и свойства веществ. Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением.	3	0,5
3	Раздел 2. Дифракционные методы анализа	Дифракционные методы анализа вещества. Интерференция и дифракция волн. Явление дифракции электронов, нейтронов и рентгеновского излучения на кристаллической решетке твердого тела. Природа рентгеновского излучения. Рассеивание рентгеновских лучей атомами. Закон Брэгга-Фульфа. Соотношения	3	0,5
4	Раздел 2. Дифракционные методы анализа	Расшифровка структуры вещества. Методология рентгеноструктурного анализа. Подготовка пробы. Анализ и интерпретация рентгенограмм.	2	0,5
6	Раздел 2. Дифракционные методы анализа	Метод далекой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS). Теоретическое описание далекой тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения. Получение структурной информации из спектров EXAFS.	2	0,5

8	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры вещества	Методы установления молекулярной структуры вещества. Колебательная спектроскопия. Колебательный спектр вещества. Принцип ИК-спектроскопии. ИК-спектр. Интерпретация ИК-спектра. ИК-спектрометры. Расшифровка ИК-спектров.	3	0,5
9	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры	Спектроскопия комбинационного рассеивания. Теоретические основы спектроскопии комбинационного рассеивания.	2	0,5
10	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры	Методы установления микроструктуры поверхности вещества. Электронная микроскопия. Теоретические основы электронной микроскопии.	3	0,5

1. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы аспирантов по дисциплине (модулю)

1. Методы анализа структуры и свойства материалов : учебно-методическое пособие для лабораторных работ [для студентов спец. 140400.68 «Техническая физика»] / Сиб. федерал. ун-т, Рос. акад. наук. Сиб. отд-ние. Ин-т физики им. Л. В. Киренского ; сост.: Г. Н. Чурилов, Н. Г. Внукова. - Электрон. текстовые дан. (PDF, 822 Кб). - Красноярск : СФУ, 2013.
2. Компьютерные методы в рентгенографии и электронной микроскопии : учеб.-метод. пособие [для студентов напр. 150400.68.00.01 «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов»] / Сиб. федерал. ун-т ; сост. Т. И. Корягина. - Электрон. текстовые дан. (PDF, 2,2 Мб). - Красноярск : СФУ, 2013.
3. Экспериментальные методы физической химии : лабораторный практикум / В. А. Рогов [и др.] ; под ред.: В. Н. Пармон, В. А. Рогов. - Долгопрудный : Интеллект, 2017. - 407 с.

2. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Сизова, О. В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии : учебное пособие [электронный ресурс]/ Сизова О. В., Иванова Н. В., Ванин А. А. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 276 с. - ISBN 978-5-8114-8475-1
2. Фомичев, В. В. Электронная спектроскопия и ее применение в химических исследованиях : учебное пособие [электронный ресурс]/ В. В. Фомичев. - Москва : РТУ МИРЭА, 2020. - 54 с.

3. Строкова, В. В. Приборы и методы исследований в материаловедении : учебное пособие [электронный ресурс] / Строкова В. В., Баскаков П. С., Сивальнева М. Н., Маркова И. Ю. - Белгород : БГТУ им. В.Г. Шухова, 2019. - 165 с.

4. Колебательная спектроскопия в изучении кристаллов : учебно-методическое пособие [электронный ресурс] / Сиб. федер. ун-т, Ин-т инж. физики и радиоэлектроники ; сост. Ю. В. Герасимова [и др.]. - Электрон. текстовые дан. (pdf, 1,7 Мб). - Красноярск : СФУ, 2019. –

5. Литвин, Ф. Ф. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика : учебное пособие [электронный ресурс] / Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова ; Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2018. - 263 с. - ISBN 978-5-16-005727-9.

6. Ищенко, А. А. Структура и динамика свободных молекул и конденсированного вещества [электронный ресурс] / А. А. Ищенко. - Москва : Физматлит, 2018. - 655 с. : цв. ил., рис., табл. - Библиогр. в конце глав. - Предм. указ.: с. 646-655. - 300 экз. - ISBN 978-5-9221-1799-9 (в пер.).

7. Колесов, Б. А. Прикладная КР-спектроскопия [электронный ресурс] / Б. А. Колесов ; отв. ред. Н. В. Суровцев ; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т неорганич. химии им. А. В. Николаева, Новосиб. нац. исслед. гос. ун-т. - Новосибирск : Издательство СО РАН, 2018. - 396 с. : граф., рис., табл. - Библиогр.: с. 387-392. - 300 экз. - ISBN 978-5-7692-1577-3 (в пер.).

8. Звеков, А. А. Спектрофотометрия в ультрафиолетовой и видимой областях. Теоретические основы и приложения для элементного анализа : учебное пособие [электронный ресурс] / Звеков А. А., Каленский А. В. - Кемерово : КемГУ, 2016. - 113 с. - ISBN 978-5-8353-2044-8

Дополнительная литература

1. Батаев, В. А. Методы структурного анализа материалов и контроля качества деталей: учебное пособие / В. А. Батаев, А. А. Батаев, А. П. Алхимов. - 2-е изд. - Москва : Флинта : Наука, 2007. - 219 с. : ил. - Библиогр. в конце гл. - ISBN 978-5-9765020-7-9. - ISBN 978-5-02-034811-0.

2. Бёккер, Юрген. Спектроскопия : монография / Ю. Бёккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - Москва : Техносфера, 2009. - 527 с. : ил. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 5070522. - 3000 экз. - ISBN 978-5-94836-220-5 (в пер.). - ISBN 978-3-80231-581-2 (нем.)

3. Сутягин, В. М. Физико-химические методы исследования полимеров : учебное пособие [электронный ресурс] / В. М. Сутягин, А. А. Ляпков. - 3-е изд., испр. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 140 с. - ISBN 978-5-8114-2712-3. Книга из коллекции Лань – Химия.

4. Пивоваров, Сергей Сергеевич. Физические основы теории оптической и рентгеновской спектроскопии : учебное пособие [электронный ресурс] / С. С. Пивоваров. - СПб : Издательство Санкт-Петербургского государственного университета, 2016. - 64 с. - ISBN 978-5-288-05653-6

5. Жданов, Герман Степанович. Дифракционный и резонансный структурный анализ. Рентгено-, электроно-, нейтроно-, мессбауэрография и мессбауэровская спектроскопия : учебное пособие для вузов : допущено Министерством высшего и среднего специального образования СССР / Г. С.

Жданов, А. С. Илюшин, С. В. Никитина ; под общ. ред. Г. С. Жданов. - Москва : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1980. - 256 с.

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

1. Российские электронные научные журналы и базы данных online
2. Научная электронная библиотека (eLIBRARY.RU): http://elibrary.ru
3. ЭБ Издательского дома «Гребенников»: http://grebennikon.ru
4. Электронная библиотека диссертаций (ЭБД) РГБ: http://dvs.rsl.ru (доступ к полному тексту), http://diss.rsl.ru (доступ к каталогу)
5. Электронная библиотека РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина: http://elib.gubkin.ru
6. Электронно-библиотечная система «Лань»: http://e.lanbook.com
7. Электронные версии ведущих российских журналов ИВИС https://eivis.ru/

Зарубежные электронные научные журналы и базы данных online

8. American Physical Society: http://publish.aps.org
9. Annual Reviews Science Collection: http://www.annualreviews.org
10. Cambridge University Press: http://www.journals.cambridge.org
11. Elsevier: http://www.sciencedirect.com
12. Institute of Physics: http://www.iop.org
13. Nature: http://www.nature.com
14. Scopus: http://www.scopus.com
15. Springer:http://www.springerlink.com
16. Wiley (Blackwell): http://www.blackwell-synergy.com
17. Royal Society of Chemistry (журналы открытого доступа): http://www.rsc.org

18. Методические указания для аспирантов по освоению дисциплины (модуля)

Учебная неделя	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах	Виды самостоятельной работы	Форма контроля
1-2	Раздел 1. Общие подходы в структурном анализе вещества	Кристаллические твердые вещества. Координационные соединения.	4	Работа с литературой и Интернет - источниками	Ответы на контрольные вопросы

3	Раздел 2. Дифракционные методы анализа	Интенсивность отражения и погасания рефлексов.	3	Работа с литературой и Интернет - источниками	Ответы на контрольные вопросы
4-5	Раздел 2. Дифракционные методы анализа	Экспериментальные установки для дифракционных методов анализа вещества. Экспериментальные установки для	4	Работа с литературой и Интернет - источниками	Ответы на контрольные вопросы
6-7	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры вещества	Аппаратная реализация спектроскопии комбинационного рассеивания. Методология КР-	4	Работа с литературой и Интернет - источниками	Ответы на контрольные вопросы
8-9	Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры вещества	Просвечивающая электронная микроскопия. Растровая электронная микроскопия.	3	Работа с литературой и Интернет - источниками	Ответы на контрольные вопросы

19. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1. Перечень необходимого программного обеспечения.

MS Office (MS Word, MS PowerPoint, MS Excel), Adobe Acrobat, Adobe Flash Player или KMPlayer, аудиопроигрыватель AdobeFlash или Winamp.

Powder Cell - программное обеспечение для полнопрофильного анализа порошковых дифракционных данных методом Ритвельда (моделирование порошковых рентгенограмм по структурным данным, визуализация и уточнение кристаллических структур, количественный анализ смесей, определение размеров кристаллитов и микронапряжений методом Вильямсона-Холла) http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/powdcell/

UnitCell - программное обеспечение для уточнения параметров элементарной ячейки вещества по индицированным порошковым дифракционным данным. http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/crush/astaff/holland/UnitCell.html

8.2. Перечень необходимых информационных справочных систем.

1. COD (Crystallography Open Database) - база данных кристаллических структур органических, неорганических, металлоорганических соединений и минералов, за исключением биополимеров http://www.crystallography.net/

2. Mincryst - кристаллографическая и кристаллохимическая база данных минералов и их структурных аналогов разработанная в Институте экспериментальной минералогии РАН http://database.iem.ac.ru/mincryst/

3. Структурная база данных http://www.chemspider.com/

4. База данных химических соединений https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

20. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое материально-техническое обеспечение для реализации дисциплины включает в себя:

- учебные аудитории, оборудованные аппаратно-программными комплексами «Малый презентационный комплекс», «Доска обратной проекции», «Средний презентационный комплекс»;
- компьютерный класс, укомплектованный современными компьютерами с возможностью к библиотечным и справочным ресурсам через Интернет.

Структура аннотации к рабочей программе дисциплины (модуля)

Аннотация к рабочей программе дисциплины Методы структурного анализа
(*наименование дисциплины*)

Цели и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины является: ознакомление аспирантов с современными методами исследования вещества для установления и уточнения его структуры. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о возможностях каждого из методов структурного анализа. Кроме того, после освоения дисциплины аспиранты должны уметь обоснованно выбирать метод или совокупность методов структурного анализа для установления или уточнения структурных данных исследуемого вещества.

Задачей изучения дисциплины является: формирование у аспирантов понимания принципа работы и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований; знание базовых основ методов структурного анализа органических и неорганических материалов; умение обоснованно и аргументировано осуществлять выбор метода структурного анализа для осуществления научно-исследовательской работы.

Структура дисциплины (распределение трудоемкости по отдельным видам учебных занятий и самостоятельной работы): практические занятия 0,5 (18) и самостоятельная 0,5 (18)
Основные разделы:
Раздел 1. Общие подходы в структурном анализе вещества;
Раздел 2. Дифракционные методы анализа
Раздел 3. Методы установления молекулярной структуры вещества.

Планируемые результаты обучения:
В результате освоения дисциплины аспирант должен знать:
5) методологию проведения структурного анализа вещества;
6) режимы и условия проведения структурного анализа вещества;
7) способы обработки и анализа результатов структурного исследования вещества
8) методы и способы представления результатов научного исследования
Аспирант должен обладать следующими умениями:
1) правильно выбирать необходимый метод структурного анализа вещества для получения необходимой информации и компилировать и анализировать его результаты
2) правильно разрабатывать методологию проведения структурного анализа для конкретных веществ и материалов;
и владеть навыками:
1) пробоподготовки образцов для осуществления структурного анализа вещества;
2) навыками работы на современном нучно-исследовательском оборудовании структурного анализа вещества;
навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач.

Форма промежуточной аттестации зачет