

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

*Факультет физико-математических и естественных наук*

Рекомендовано МССН  
по направлению 04.00.00 «Химия»

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ**

**Рекомендуется для направления подготовки**

**04.04.01 «ХИМИЯ»**

**Направленность программы (профиль)**

**«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»**

**1. Цели и задачи дисциплины:** Основной целью освоения дисциплины является ознакомление студентов-химиков с основами современных физико-химических методов исследования. Для достижения поставленной цели выделяются такие задачи курса, как получение фундаментальных знаний о теории и практике физико-химических методов анализа веществ, основных закономерностях, лежащих в основе методов, их связи с современными технологиями, особенностях экспериментальной реализации методов.

**2. Место дисциплины в структуре ОП ВО:**

Дисциплина «ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 и является дисциплиной модуля 2 по выбору.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

**Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций**

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
<b>Универсальные компетенции</b>			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Актуальные задачи современной химии Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Преддипломная практика Экспериментальные методы исследования в химии
<b>Профессиональные компетенции</b>			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования	Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии

	НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика
--	---	---

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:  
**Формируемые компетенции**

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

#### **Знать:**

- основные принципы и понятия, лежащих в основе физико-химических методов исследования;
- характер научных и практических задач, решаемых с помощью различных физико-химических методов;
- значение и области применения, основные пути их совершенствования;
- принципы работы и устройство современной научной аппаратуры.

#### **Уметь:**

- проводить обработку и интерпретацию первичных экспериментальных данных, полученных с использованием изучаемых методов;
- правильно рассчитывать, представлять и критически осмысливать результаты;

- применять полученные знания к модельным ситуациям на примерах решения расчётных задач.

**Владеть:**

- навыками и техникой выполнения экспериментальных задач;
- методами регистрации и обработки результатов экспериментов;
- навыками работы на соответствующих установках для физико-химических исследований.

**4. Объем дисциплины и виды учебной работы**

Общая трудоемкость дисциплины составляет **4** зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		3	4		
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	<b>60</b>	36	24		
В том числе:					
Лекции	<b>34</b>	18	16		
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	<b>26</b>	18	8		
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	<b>84</b>	36	48		
Общая трудоемкость	час	144	72	72	
	зач. ед.	4	2	2	

**5. Содержание дисциплины**

**5.1. Содержание разделов дисциплины**

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Рентгено-абсорбционная спектроскопия EXAFS / XANES	Физические основы спектроскопии EXAFS. Методы измерения EXAFS, используемое оборудование: рентгеновские монохроматоры, детекторы. Основы теории спектроскопии EXAFS. Подходы и программы для обработки спектров EXAFS. Основы теории спектроскопии XANES. Исследование локальной атомной и электронной структуры методом XANES спектроскопии. Зависимость теоретических спектров от структурных и электронных эффектов. Совместный анализ EXAFS и XANES.
2.	Малоугловое рассеяние	Фундаментальные основы метода малоуглового рассеяния, связь структурных характеристик образца с кривой рассеяния, основные способы и приемы при проведении обратного преобразования. Основные характеристики и особенности экспериментальной реализации метода на лабораторных рентгеновских источниках и с использованием синхротронного

		излучения.
3.	Порошковая дифрактометрия	Теоретические основы рентгеновской дифракции. Электронная и нейтронная дифракция. Отличие порошкового и монокристалльного экспериментов, перекрытие пиков. Индексирование дифрактограмм. Основные методы количественного фазового анализа.
4.	Рентгеноструктурный анализ	Современные инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. Выбор излучения и его монохроматизация. Регистрация рентгеновского излучения. Рентгеновские дифрактометры. Общие этапы расшифровки и уточнения кристаллической структуры. Основные данные о кристаллической структуре. Формат CIF, структурные базы данных.
5.	Белковая кристаллография	Особенности монокристалльной дифракции на белках: проблемы получения препарата; радиационное разрушение (причины появления, способы борьбы и использование в своих целях); установка и сбор данных. Программы BEST и RADDOS. Построение модели и ее уточнение. Программы BALBES и ARP/wARP. Уточнение с помощью COOT и REFMAC5.

## 5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Лаб. зан.	СРС	Всего час.
1.	Рентгеноабсорбционная спектроскопия EXAFS / XANES	6	10	12	28
2.	Малоугловое рассеяние	6		8	12
3.	Порошковая дифрактометрия	6	8	12	28
4.	Рентгеноструктурный анализ	10	8	12	28
5.	Белковая кристаллография	6		8	12
	Всего	34	26	84	144

## 6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)
1	1	Зависимость теоретических спектров от структурных и электронных эффектов. Анализ и обработка EXAFS и XANES спектров.	10
2	3	Индексирование дифрактограмм. Основные методы количественного фазового анализа.	8
3	4	Этапы расшифровки и уточнения кристаллической структуры. Основные данные о кристаллической структуре. Создание CIF.	8
	Всего		26

## 7. Практические занятия (семинары) Не предусмотрено учебным планом

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

Лаборатория спецкурсов ауд. 614

Учебная химическая лаборатория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная мультимедийным проектором. Компьютеры для проведения вычислений, обработки результатов и доступа к информационным системам.

## **9. Информационное обеспечение дисциплины**

а) программное обеспечение

Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions (EES)

## **10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:**

### **а) основная литература**

1. EXAFS– спектроскопия / Д.И. Кочубей, Ю.А. Бабанов, К.И. Замараев и др. – Новосибирск, Наука, 1988. – 306 с.

1. Синхротронное излучение в спектроскопии / В.В. Михайлин – М.: НИИЯФ МГУ, 2007. – 161 с.

2. М.А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений, М.: Высшая школа, 1989. – 192 с.

### **б) дополнительная литература**

1. Рентгенографический и электронно-оптический анализ / С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев – М.: МИСИС, 2001. – 328 с.

2. Теоретико-групповые методы в дифракционных исследованиях структуры и свойства твердых тел / А.С. Илюшин, Е.Н. Овчинникова – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1996.

3. Armel Le Bail. Курс лекций по рентгеноструктурному анализу, руководство по пользованию SDPD-D (база данных по определению структуры из данных по порошковой дифракции). <http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/armel/tutorials.html>

4. От спектроскопии EXAFS к спектроскопии XANES: новые возможности исследования материи / А.В. Солдатов / Соросовский Образовательный Журнал, 1998. – № 12. – с. 101–104.

5. Физические методы исследования в химии : Учебник для вузов / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М.: Мир, 2009, 2012. – 683 с. - ISBN 978-5-03-003770-7 : 680.00.

6. М.А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений, М.: Высшая школа, 1989. – 192 с.

7. Физические методы исследования неорганических веществ [Текст]: Учебное пособие для вузов / Баличева Тамара Георгиевна; Под ред. А.Б.Никольского. – М.: Академия, 2006. – 448 с. – (Высшее профессиональное образование. Естественные науки). - ISBN 5-7695-2261-5 : 290.40.

8. Физические методы определения строения органических соединений [Текст]: Учебное пособие / Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин / Под ред. Б.В. Иоффе. – М.: Высшая школа, 1984. – 336 с.

9. Физические методы в химии [Текст]: В 2-х томах. Т.1 / Драго Рассел; Пер. с англ. А.А. Соловьянова / Под ред. О.А. Реутова. – М.: Мир, 1981. – 422 с.

10. Физические методы в химии [Текст]: В 2-х томах. Т.2 / Драго Рассел; Пер. с англ. А.А. Соловьянова / Под ред. О.А. Реутова. – М.: Мир, 1981. – 456 с.

## 11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Согласно учебному плану при изучении дисциплины «ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ» предполагается посещение студентами лекций и участие в дискуссиях, выполнение домашних заданий, написание тестов. В конце изучения дисциплины – промежуточный контроль в виде письменно-устного зачета.

Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку ко всем видам работ и контроля.

При подготовке студент должен использовать теоретические данные лекционных материалов, а также данные литературных источников.

Ознакомление с соответствующим теоретическим разделом лекционного курса предполагает проработку и повторение пройденного материала, ответы на контрольные вопросы.

Выполнение домашних заданий предусматривает знакомство со специальными программами обработки соответствующих экспериментальных данных

Для подготовки к контрольным мероприятиям предусмотрены примеры тестовых заданий и вопросы для самопроверки.

## 12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

**Разработчик**

Заведующий кафедрой  
неорганической химии

В.Н. Хрусталеv

**Руководитель программы**

профессор,  
кафедры органической химии

Варламов А. В.