Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олеферальное государственное автономное образовательное учреждение Должность: Ректор дата подписания: 14.08-2022 Цесто образования «Российский университет дружбы народов»

Уникальный программный ключ: ca953a012<u>0d891083f9396730 **Факуультет**</u> физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

#### Физические методы исследования веществ и материалов

(наименование дисциплины/модуля)

### Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.04.01 «Химия»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

«Фундаментальная и прикладная химия»

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов» 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. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	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		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
	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий
М-ПК-1-н	исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	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	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных
	выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

## 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Физические методы исследования веществ и материалов» относится к элективной компоненте блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции Предшествующие дисциплины/модули, практики*		Последующие дисциплины/модули, практики*	
УК-6	Способен	Актуальные задачи	Актуальные задачи	
	определить и	современной химии	современной химии	
	реализовать	Спектральные методы в	Физико-химический анализ	
	приоритеты	неорганической химии	Методика преподавания	
	собственной	Химия	химии в вузе	
	деятельности и	координационных	Применение ПО в	
	способы ее	соединений	неорганическом	
	совершенствования	Резонансные методы в	эксперименте	
	на основе	химии	Термоаналитические методы	
	самооценки	Электрохимические	в химии	
		методы исследования	Химия твердого тела	
		Научно-	Бионеорганическая химия	
		исследовательская	Научно-исследовательская	
		работа	работа	
		Экспериментальные	Преддипломная практика	
		методы исследования в		
		химии		
М-ПК-1-н	Способен	Спектральные методы в	Методика преподавания	
	планировать	неорганической химии	химии в вузе	
	работу и выбирать	Химия	Применение ПО в	
	адекватные методы	координационных	неорганическом	
	решения научно-	соединений	эксперименте	
	исследовательских	Резонансные методы в	Термоаналитические методы	
	задач в выбранной	химии	в химии	
	области химии,	Электрохимические	Химия твердого тела	
	химической	методы исследования	Бионеорганическая химия	
	технологии или	Научно-		

	смежных с химией	исследовательская работа	Научно-исследовательская работа
	науках	расота Экспериментальные методы исследования в	Преддипломная практика
		химии	
М-ПК-2-н	Способен	Спектральные методы в	Методика преподавания
	проводить	неорганической химии	химии в вузе
	патентно-	Химия	Применение ПО в
	информационные	координационных	неорганическом
	исследования в	соединений	эксперименте
	выбранной области	Резонансные методы в	Термоаналитические методы
	химии и/или	химии	в химии
	смежных наук	Электрохимические	Химия твердого тела
		методы исследования	Бионеорганическая химия
		Научно-	Научно-исследовательская
		исследовательская	работа
		работа	Преддипломная практика
		Экспериментальные	
		методы исследования в	
		химии	

# 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов» составляет 4 зачетных единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для <u>**ОЧНОЙ**</u>

формы обучения

Вид учебной работы		всего,	Семестр(-ы)			
		ак.ч.	1	2	3	4
Контактная работа, ак.ч.		72		72		
в том числе:						
Лекции (ЛК)		36		36		
Лабораторные работы (ЛР)		36		36		
Практические/семинарские занятия (С3)						
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.		54		54		
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.		18		18		
Of war investigation and the second s	ак.ч.	144		144		
Общая трудоемкость дисциплины	зач.ед.	4		4		

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 1.	Тема 1.1. Физические основы спектроскопии	ЛК
Рентгеноабсорбционная	EXAFS. Методы измерения EXAFS,	
спектроскопия EXAFS /	используемое оборудование: рентгеновские	
XANES	монохроматоры, детекторы.	

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
	Тема 1.2. Основы теории спектроскопии EXAFS. Подходы и программы для обработки спектров EXAFS.	ЛК, ЛР
	Тема 1.3. Основы теории спектроскопии XANES. Исследование локальной атомной и электронной структуры методом XANES спектроскопии.	ЛК, ЛР
	Тема 1.4. Определения формальной степени элемента в исследуемом соединении. Разложение экспериментального спектра в линейную комбинацию спектров реперных соединений; метод главных компонент (Principal Component Analysis).	ЛК, ЛР
	Тема 1.5. Спектроскопия XANES смешанно- и промежуточно-валентных соединений. Программы для <i>ab initio</i> расчета XANES спектров.	ЛК, ЛР
	Тема 1.6. Зависимость теоретических спектров от структурных и электронных эффектов. Совместный анализ EXAFS и XANES.	ЛК
	Тема 2.1. Фундаментальные основы метода малоуглового рассеяния, связь структурных характеристик образца с кривой рассеяния, основные способы и приемы при проведении обратного преобразования.	ЛК
Раздел 2. Малоугловое рассеяние	Тема 2.2. Основные характеристики и особенности экспериментальной реализации метода на лабораторных рентгеновских источниках и с использованием синхротронного излучения. Особенности конструкции экспериментальных установок.	ЛК, ЛР
	Тема 2.3. Основные программы для обработки данных из пакета ATSAS: программа Фурьепреобразования с регуляризацией GNOM, программа определения характеристик многокомпонентных полидисперсных систем MASSHA и программа для восстановления трехмерной формы рассеивающих центров в монодисперсной системе DAMMIF.	ЛК, ЛР
Раздел 3. Порошковая дифрактометрия	Тема       3.1.       Теоретические       основы рентгеновской дифракции.       Электронная и нейтронная и дифракция.       Отличие порошкового и монокристального экспериментов, перекрывание пиков.	ЛК
дифриктометрия	Тема 3.2. Индицирование дифрактограмм. Метод гомологии и методы полнопрофильного структурного анализа (метод Ритвельда).	ЛК, ЛР

Наименование раздела	Содержание раздела (темы)	Вид учебной
дисциплины	Table 2.2. Operations and the second	работы
	Тема 3.3. Основные методы количественного	ЛК, ЛР
	фазового анализа: метод прямой калибровки,	
	метод добавок, метод внутреннего стандарта.	
	Метод корундовых чисел (внешнего	
	стандарта). Текстурный анализ и анализ микроструктуры. Базы данных ICDD	
	Тема 4.1. Современные инструментальные	ЛК
	методы рентгеноструктурного анализа.	
	Выбор излучения и его монохроматизация.	
	Регистрация рентгеновского излучения.	
	Рентгеновские дифрактометры.	
	Тема 4.2. Общие этапы расшифровки и	ЛК, ЛР
	уточнения кристаллической структуры.	
Раздел 4.	Фазовая проблема и пути ее решения.	
Рентгеноструктурный	Аномальное рассеяние.	
анализ	Тема 4.3. Программы определения	ЛК, ЛР
	геометрических характеристик	
	кристаллических структур. Программы	
	визуализации кристаллических структур.	
	Субструктура и сверхструктура.	
	Квазикристаллы. Основные данные о	
	кристаллической структуре. Формат СІF,	
	структурные базы данных.	
	Тема 5.1. Особенности монокристальной	ЛК
	дифракции на белках: проблемы получения	
	препарата; радиационное разрушение	
	(причины появления, способы борьбы и	
	использование в своих целях); установка и	
кристаллография	сбор данных.	
	Тема 5.2. Программы BEST и RADDOSE.	ЛК, ЛР
	Построение модели и ее уточнение.	
	Программы BALBES и ARP/wARP.	
	Уточнение с помощью СООТ и REFMAC5.	annua nakamu C2

<sup>\* -</sup> заполняется только по  $\underline{\mathbf{OYHOЙ}}$  форме обучения:  $\mathit{ЛK}$  –  $\mathit{лекции}$ ;  $\mathit{ЛP}$  –  $\mathit{лабораторные работы}$ ;  $\mathit{C3}$  –  $\mathit{семинарские занятия}$ .

# 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами	

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
	мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием	Проектор Mitsubishi XD430U, Экран для проектора Lumien
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся, оснащенная комплектом специализированной мебели.	проектор, экран для проектора, wi-fi

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

- 1. EXAFS— спектроскопия / Д.И. Кочубей, Ю.А. Бабанов, К.И. Замараев и др. Новосибирск, Наука, 1988. 306 с.
- 2. Синхротронное излучение в спектроскопии / В.В. Михайлин М.: НИИЯФ МГУ, 2007.-161 с.
- 3. М.А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений, М.: Высшая школа, 1989. 192 с.

#### 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.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

- 1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:
- Электронно-библиотечная система РУДН ЭБС РУДН <a href="http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web">http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web</a>
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <a href="http://www.biblioclub.ru">http://www.biblioclub.ru</a>
- ЭБС Юрайт <a href="http://www.biblio-online.ru">http://www.biblio-online.ru</a>
- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru
- ЭБС «Лань» http://e.lanbook.com/
  - 2. Базы данных и поисковые системы:
- NCBI: https://p.360pubmed.com/pubmed/
- Вестник РУДН: режим доступа с территории РУДН и удаленно <a href="http://journals.rudn.ru/">http://journals.rudn.ru/</a>
- Научная библиотека Elibrary.ru: доступ по IP-адресам РУДН по адресу: <a href="http://www.elibrary.ru/defaultx.asp">http://www.elibrary.ru/defaultx.asp</a>
- ScienceDirect (ESD), «FreedomCollection», "Cell Press" ИД "Elsevier". Есть удаленный доступ к базе данных, доступ по IP-адресам РУДН (или удаленно по индивидуальному логину и паролю).
- Aкадемия Google (англ. Google Scholar) бесплатная поисковая система по полным текстам научных публикаций всех форматов и дисциплин. Индексирует полные тексты научных публикаций. Режим доступа: <a href="https://scholar.google.ru/">https://scholar.google.ru/</a>
- Scopus наукометрическая база данных издательства ИД "Elsevier". Доступ на платформу осуществляется по IP-адресам РУДН или удаленно. <a href="http://www.scopus.com/">http://www.scopus.com/</a>
- Web of Science. Доступ на платформу осуществляется по IP-адресам РУДН или удаленно. <a href="http://login.webofknowledge.com/">http://login.webofknowledge.com/</a>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля\*:

- 1. Презентационные материалы по дисциплине «Физические методы исследования веществ и материалов».
  - 2. Программы для обработки спектров EXAFS, XANES.
- 3. Методические рекомендации по дисциплине «Физические методы исследования веществ и материалов».

\* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины в ТУИС!

# 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система\* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Физические методы исследования веществ и материалов» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

\* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН (положения/порядка).

РАЗРАБОТЧИКИ:	000		
Заведующий кафедрой неорганической химии	Juffe	min E	Хрусталев В.Н.
Должность, БУП	<del>70</del>	Подиксь	Фамилия И.О.
РУКОВОДИТЕЛЬ БУП: Кафедра неорганической химии	Shep	Tuny &	Хрусталев В.Н.
Наименование БУП	<del></del> / <del></del>	Подичеь	Фамилия И.О.
РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО: Декан ФФМиЕН,			
заведующий кафедрой органической химии	Coans.	und	Воскресенский Л.Г.
Должность, БУП	Под	пись	Фамилия И.О.