

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
аналитической химии



Елисеева Т.В.
подпись, расшифровка подписи
26.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФТД.В.02 Методы исследования поверхности

Код и наименование дисциплины в соответствии с Учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: Физическая химия, органическая химия

3. Квалификация (степень) выпускника: магистр

4. Форма образования: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: Аналитической химии

6. Составители программы: д.х.н., доцент Карпов Сергей Иванович

7. Рекомендована: НМС химического факультета 25.04.2023, протокол №4.

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

(отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2023 / 2024

Семестр: 1

9. Цели и задачи учебной дисциплины: _____

Цель: Ознакомление магистрантов с современными аспектами основ методов исследования твердофазных материалов, поверхности, физико-химических методов исследования материалов, сорбентов, катализаторов и технологических процессов с их применением. В рамках факультативного курса рассматриваются модели, позволяющие описать процессы, протекающие в гетерогенных системах. Особое внимание уделяется вопросам современных методов исследования (ИК-спектроскопии, рентгеновской дифракции, адсорбционных методов исследования структуры, поверхности, пористости) твердофазных сорбентов и катализаторов, рассматриваются теоретические основы кислотно-основного гетерогенного катализа.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: (цикл, к которому относится дисциплина, требования к входным знаниям, умениям и компетенциям, дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

Факультатив.

иметь представление об актуальных проблемах современной теоретической и экспериментальной химии; понимать их значение для развития науки и производства

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ-3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области физической и неорганической химии	ПК-3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знать: принципы сбора и систематизации информации в процессе научно-исследовательской работы. Уметь: анализировать и сравнивать современные методы исследования поверхности, используя литературные данные. Владеть: основными приемами работы с печатными и цифровыми источниками информации при изучении методов исследования поверхности.
		ПК-3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных	Знать: современные аспекты развития методов исследования поверхности. Уметь: формулировать цели и задачи исследования по практическому применению методов исследования поверхности. Владеть: навыками практического

			результатов	применения полученных результатов в области физической и аналитической химии.
--	--	--	-------------	---

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 2 / 72 ..

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) зачет

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		№ семестра 1	№ семестра	...
Аудиторные занятия				
в том числе: лекции		36		
Самостоятельная работа		36		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – __ час.)				
Итого:		72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Введение.	Введение – Экономическое рассмотрение.
1.2	Теоретические основы физико-химии материалов	Твердофазные материалы. Основные понятия и определения. Теоретические основы физико-химии материалов. Химия поверхности.
1.3	Методы исследования материалов.	Методы исследования твердофазных материалов. Химические методы исследования.
1.4	Методы исследования материалов.	Спектральные методы исследования. Колебательная спектроскопия (ИК, Раман). Электронная спектроскопия. ЯМР-спектроскопия.
1.5	Методы исследования материалов.	Адсорбционные методы. Исследование адсорбционных равновесий. Метод низкотемпературной адсорбции газов (азот, криптон и др.)
1.6	Методы исследования материалов.	Другие методы исследования поверхности. Критическое поверхностное натяжение смачивания. Ртутная порометрия. Термические методы.

1.7	Применение материалов.	Применение твердофазных материалов. Применение в сорбции, катализе
1.8	Основы гетерогенного катализа	Основы гетерогенного катализа: адсорбция, адсорбционная теория гетерогенного катализа, кинетика.
1.9	Модели гетерогенного катализа.	Модели гетерогенного катализа: классификация по электронной структуре; классификация по стерическим факторам; энергетические факторы.
1.10	Кислотно-основный гетерогенный катализ	Пример кислотно-основного гетерогенного катализа, структура цеолитов и их свойства.
1.11	Макрокинетика процессов	Макрокинетика процессов в сорбционных и каталитических динамических системах.
1.12	Избранные технологические процессы с применением катализаторов.	Избранные технологические процессы с применением катализаторов. Крекинг. Изомеризация. Алкилирование.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение.	3	–	–	3	6
	Теоретические основы физико-химии материалов	3			3	6
	Методы исследования материалов.	12			12	24
	Применение материалов.	3			3	6
2	Основы гетерогенного катализа	3	–	–	3	6
3	Модели гетерогенного катализа.	3	–	–	3	6
4	Кислотно-основный гетерогенный катализ	3	–	–	3	6
5	Макрокинетика процессов	3	–	–	3	6
6	Избранные технологические процессы с применением катализаторов.	3	–	–	3	6

Итого:	36	–	–	36	72
--------	----	---	---	----	----

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студенты выполняют задания преподавателя при подготовке к занятиям, пользуясь основной и дополнительной литературой, а также интернет-ресурсами. Одной из форм самостоятельной работы является написание рефератов.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	<i>Сальников В.Д. Современные методы аналитического контроля материалов : лаб. практикум / В.Д. Сальников, И.В. Муравьева. - Москва : МИСиС, 2020. - 77 с. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/Misis_494.html</i>
2	<i>Кристиан Г. Аналитическая химия: в 2 т. / Г. Кристиан. – М.: БИНОМ, лаборатория знаний, 2009 . – (лучший зарубежный учебник).- Т.2.- 504 с.</i>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1.	<i>Киперман С. Л. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе / С.Л. Киперман .— М. : Химия, 1979 .— 349 с.</i>
2.	<i>Нефедов В.И., Черепин В.Т. Физические методы исследования поверхности твердых тел. М.: Наука, 1983, 296с.</i>
3.	<i>Методы анализа поверхности/ Под ред А.Зандерны. М.: Мир, 1979, 582с.</i>
4.	<i>Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М.: Мир, 1989, 568с.</i>
5.	<i>Модифицированные кремнеземы в сорбции, катализе и хроматографии / [Г.В. Лисичкин, Г.В. Кудрявцев, А.А. Сердан и др.] ; Под ред. Г.В. Лисичкина .— М. : Химия, 1985 .— 246</i>
6.	<i>Томас Дж. Гетерогенный катализ / Дж. Томас, У. Томас ; Пер. с англ. Д.А. Кондратьева, М.В. Сердобова; Под ред. А.М. Рубинштейна .— М. : Мир, 1969 .— 452 с.</i>
7.	<i>Паукштис Е.А. Инфракрасная спектроскопия в гетерогенном кислотном катализе /Е.А. Паукштис. – Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1992. – 253 с.</i>
8.	<i>J. Rouquerol, F. Rouquerol, K. S. W. Sing, P. Llewellyn, G. Maurin. Adsorption by Powders and Porous Solids: Principles, Methodology and Applications, Academic Press (2014).</i>

9.	<i>Грег С. Адсорбция, удельная поверхность, пористость / С. Грег, К. Синг. – Москва : Мир, 1984. – 310 с.</i>
10.	<i>Перспективы синтеза и использования упорядоченных мезопористых материалов при сорбционно-хроматографическом анализе, разделении и концентрировании физиологически активных веществ (обзор) / С.И. Карпов, F. Roessner, В.Ф. Селеменев, С.С. Гульбин, Н.А. Беланова, Е.В. Бородина, Е.О. Корабельникова, О.О. Крижановская, И.В. Недосекина // Сорбционные и хроматографические процессы. — Воронеж, 2013. — Т. 13, вып. 2. - С. 125-140 .</i>
11.	<i>Структура и гидратация органо-неорганических композитных материалов на основе МСМ -41 по данным ИК-спектроскопии / С.И. Карпов, F. Roessner, В.Ф. Селеменев, Л.С. Нечаева, Н.А. Беланова, Е.В. Бородина, А.Н. Харин, Ю.Д. Меркулова, Н.В. Белякова, Л.А. Синяева // Сорбционные и хроматографические процессы. — Воронеж, 2013. — Т. 13, вып. 3. - С. 273--283 .</i>
12.	<i>Гетерогенный катализ : учебное пособие для студ. вузов, обуч. по специализации 011013 "Хим. кинетика и катализ" специальности 011000 "Химия" / О.В. Крылов .— М. : Академкнига, 2004 .— 679 с. : ил., табл. — (Классический университетский учебник XXI века) .— Библиогр.: с. 665 - 668 .— Предм. указ.: с. 669 - 676.</i>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
8	http://www.lib.vsu.ru-3НБ ВГУ
9	http://www.chemie.uni-oldenburg.de/
10	http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/viu/Chemie/Technische_00032Chemie/index.html
11	http://www.roessner.chemie.uni-oldenburg.de/
12	Образовательный портал "Электронный университет ВГУ" https://edu.vsu.ru/

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru/>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

По решению кафедры оценки за экзамен/зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен/зачет на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Введение.	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Сообщение/доклад/презентация
2.	Теоретические основы физико-химии материалов	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Контрольная работа
3.	Методы исследования материалов.	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Сообщение/доклад/презентация
4.	Применение материалов.	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Сообщение/доклад/презентация
5.	Основы гетерогенного катализа	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Контрольная работа
6.	Модели гетерогенного катализа.	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Контрольная работа
7.	Кислотно-основный гетерогенный катализ	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Контрольная работа
8.	Макрокинетика процессов	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Контрольная работа
9.	Избранные технологические процессы с применением катализаторов.	ПК-3	ПК-3.1, ПК-3.2	Сообщение/доклад/презентация
Промежуточная аттестация форма контроля - зачет				Собеседование по билетам

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Перечень заданий для проверки сформированности компетенции ПК-3.1, ПК-3.2:

тестовые задания:

- 1) Укажите как меняется доля атомов, находящихся на поверхности сферической частицы с увеличением размера этой частицы.
 - a. Увеличивается.
 - b. **Уменьшается.**
 - c. не изменяется.
- 2) Удельную площадь поверхности можно оценить с использованием методов:
 - a. **Бренауэра-Эммета-Теллера (БЭТ).**
 - b. **Баррета-Джойнера-Халенды (ВЖН).**
 - c. Бугера-Ламберта-Бера (БЛБ).
 - d. Ломакина-Шайбе (ЛШ).
- 3) Кремнеземы и цеолиты могут быть использованы
 - a. **В кислотном-основном гетерогенном катализе.**
 - b. **В сорбционных процессах выделения и разделения веществ.**
 - c. В 3D-принтерах.
 - d. В качестве квантовых компьютеров.
- 4) Применение колебательной спектроскопии при исследовании поверхности и материалов основано
 - a. **На взаимодействии вещества с электромагнитным излучением.**
 - b. На сорбции веществ твердофазными материалами.
 - c. На протекании электрохимической реакции на границе раздела фаз.
 - d. На протекании химической реакции (осадкообразования, протолиза, окисления-восстановления, комплексообразования).
- 5) При планировании исследования материалов и поверхности в первую очередь нужно
 - a. **Изучить литературу по теме исследования с использованием отечественных академических журналов и рейтинговых рецензируемых зарубежных журналов.**
 - b. **Провести критический анализ результатов НИР и НИОКР по теме исследования.**
 - c. Прочитать статьи с описанием материалов в Википедии.
 - d. «Погуглить» в интернете.
- 6) Укажите термин, характеризующийся следующим определением:
Объекты, размер которых хотя бы в одном измерении должен быть соизмерим с корреляционным радиусом того или иного физического явления (например, длины свободного пробега электронов, фононов, длины когерентности в сверхпроводнике, размером магнитного домена или зародыша твердой фазы). (**Наноматериалы**)
- 7) Укажите один из наиболее широко используемых химических методов исследования твердофазных материалов. (**титриметрия**).

- 8) Перечислите физико-химические методы исследования материалов и поверхности (**Спектральные методы исследования, Колебательная спектроскопия (ИК, КР), ЯМР-спектроскопия**)
- 9) Укажите физические методы, широко используемые при локальном анализе и исследовании поверхности (**Рентгенофазовый анализ (XRD), электронно-зондовый микроанализ (ЭЗМА), сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ), Оже-электронная спектроскопия (ОЭС) и др.**)
- 10) Укажите Адсорбционный метод исследования поверхности. (**Метод низкотемпературной адсорбции газов (азот, криптон и др.)**)

Перечень заданий, тем рефератов, тем презентаций, докладов:

1. Твердофазные материалы.
2. Химия поверхности.
3. Методы исследования твердофазных материалов.
4. Спектральные методы исследования поверхности и материалов.
5. Колебательная спектроскопия (ИК, Раман) исследования поверхности и материалов.
6. Электронная спектроскопия. ЯМР-спектроскопия исследования поверхности и материалов.
7. Адсорбционные методы исследования поверхности и материалов.
8. Метод низкотемпературной адсорбции газов (азот, криптон и др.)
9. Теория равновесия адсорбция-десорбция. Гистерезис адсорбции. Капиллярная (или пористая) конденсация. Классификация изотерм физической адсорбции. Типы адсорбционных изотерм.
10. Типы гистерезиса адсорбции. Информация о структуре, поверхности и пористости твердофазных материалов, получаемая на основе изотерм адсорбции.
11. Изотермы адсорбции Ленгмюра, Бренауэра-Эммета-Теллера. Линейные формы уравнений Ленгмюра, Фрейндлиха, БЭТ.
12. Методы изучения поверхности и пористости материалов. Метод БДХ (метод Баррета-Джойнера-Халенды (BJH, Barret-JoynerHalenda). t-Метод ДеБура и Липпенса (t-plot method DeBoer-Lippens). Уравнение Кельвина.
13. Методы определения пористости, распределения пор по размерам. Расчет объема, диаметра пор методом Баррета-Джойнера-Халенда, Методом Делмора-Хилла.
14. Полуэмпирические методы Horvath и Kawazoe (метод НК), Saito, Foley, Cheng и Yang для оценки распределения пор по размерам для щелевых, цилиндрических и сферических пор.
15. Другие методы исследования поверхности. Критическое поверхностное натяжение смачивания. Ртутная порометрия.
16. Термические методы исследования материалов.
17. Вычислительные процедуры, основанные на теории функционала плотности (DFT)
18. Кислотно-основной гетерогенный катализ и сферы его применения.
19. Цеолиты их свойства и применение.
20. Технологические процессы с применением катализаторов.
21. Крекинг и сферы его применения.
22. Изомеризация и сферы применения.
23. Алкилирование и сферы применения.
24. Химические методы исследования.
25. Применение твердофазных материалов. Применение в сорбции, катализе

Перечень заданий для контрольных работ

Тема. Основы гетерогенного катализа и методы исследования катализаторов.

Вариант 1.

1. Твердофазные материалы.
2. Модели гетерогенного катализа.

Вариант 2.

1. Методы исследования твердофазных материалов.
2. Адсорбция.

Вариант 3.

1. Колебательная спектроскопия (ИК, Раман) исследования поверхности и материалов.
2. Термические методы.

Описание технологии проведения: письменная работа.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания):

Отлично – 95-100%; хорошо – 75-80%; удовлетворительно – 55-60%;
неудовлетворительно – менее 55%.

Задания раздела 20.1 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету

Перечень вопросов к зачету:

Раздел 1. Введение

Экономическое рассмотрение.

Раздел 2. Теоретические основы физико-химии материалов

Твердофазные материалы. Основные понятия и определения. Теоретические основы физико-химии материалов. Химия поверхности.

Раздел 3. Методы исследования материалов.

Методы исследования твердофазных материалов. Химические методы исследования.

Спектральные методы исследования. Колебательная спектроскопия (ИК, Раман).

Электронная спектроскопия.

ЯМР-спектроскопия.

Адсорбционные методы. Исследование адсорбционных равновесий.

Метод низкотемпературной адсорбции газов (азот, криптон и др.)

Другие методы исследования поверхности.

Критическое поверхностное натяжение смачивания.

Ртутная порометрия.

Термические методы исследования материалов.

Раздел 4. Применение материалов

Применение материалов в сорбционных процессах.

Применение в катализе.

Раздел 5. Основы гетерогенного катализа

Основы гетерогенного катализа: адсорбция, адсорбционная теория гетерогенного катализа, кинетика.

Раздел 6. Модели гетерогенного катализа

Модели гетерогенного катализа: классификация по электронной структуре; классификация по стерическим факторам; энергетические факторы.

Раздел 7. Кислотно-основный гетерогенный катализ

Пример кислотно-основного гетерогенного катализа, структура цеолитов и их свойства.

Раздел 8. Физико-химические методы исследования катализаторов

Физико-химические методы исследования катализаторов. Спектральные методы. Термические методы.

Раздел 9. Избранные технологические процессы с применением катализаторов

Избранные технологические процессы с применением катализаторов. Крекинг. Изомеризация. Алкилирование.

Описание технологии проведения

Зачет проводится в письменной форме. Студент обязан максимально подробно и с примерами изложить суть каждого вопроса. Преподаватель имеет право на уточняющие и дополнительные вопросы в пределах теоретической и практической части данной дисциплины.

Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное знание учебного материала, предусмотренного рабочей программой, успешное выполнение всех заданий. Ответ обоснован, аргументирован. Допущены незначительные ошибки, неточности, которые исправлены после замечания преподавателя.		<i>Зачтено</i>
Знания несистематические, отрывочные. В ответах допущены грубые принципиальные ошибки. Ошибки не устраняются по дополнительным вопросам преподавателя.	–	<i>Не зачтено</i>