

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт химии твердого тела
Уральского отделения Российской академии наук
(ИХТТ УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль) программы: Физическая химия

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Федеральное агентство научных организаций
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
**ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКА-
ДЕМИИ НАУК (ИХТТ УрО РАН)**



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХТТ УрО РАН

В.Л. Кожевников

« 04 » ноября 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль) программы: Физическая химия

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
на заседании Учёного совета ИХТТ УрО
РАН протокол № 7 от « 03 » ноября 2017 г.

ЕКАТЕРИНБУРГ

2017 г.

Федеральное агентство научных организаций
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
**ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКА-
ДЕМИИ НАУК (ИХТТ УрО РАН)**



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХТТ УрО РАН
В. Л. Кожевников
« 18 » 09 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
**СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль) программы: Физическая химия

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

ЕКАТЕРИНБУРГ
2015 г.


Составители:
Заведующий аспирантурой, к.х.н., доцент

 Н.С.Кожевникова

Старший научный сотрудник лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. проф. А.Л.Ивановского, к.ф.-м.н.

 А.С.Ворох

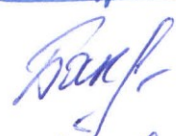
Рецензенты:
Заместитель директора института по научным вопросам, д.х.н.

 М.В.Кузнецов


Заведующий лабораторией структурного и фазового
анализа, к.х.н.

 А.П.Тютюнник

Старший научный сотрудник лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. проф. А.Л.Ивановского, к.ф.-м.н.

 И.В.Бакланова

Научный сотрудник лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. проф. А.Л.Ивановского, к.ф.-м.н.

 Я.В.Бакланова

Согласовано:
Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН, д.х.н.

 Т.А. Денисова

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Учёного совета
ИХТТ УрО РАН протокол № 9 от «17» сентября 2015 г.

АННОТАЦИЯ

Рабочая программа дисциплины «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (Приказ Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869).

Рабочая программа «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» соответствует требованиям, обязательным при реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования - программ подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки (далее соответственно - программа аспирантуры, направление подготовки).

В рабочей программе используются следующие сокращения:

ИХТТ УрО РАН - Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук;

УК - универсальные компетенции;

ОПК - общепрофессиональные компетенции;

ПК - профессиональные компетенции;

ООП – основная образовательная программа;

ФГОС ВО - федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования.

Дисциплина «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» относится к вариативной части (обязательные дисциплины) учебного плана ООП аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» и направленности «Физическая химия» (Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Аспирант по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки готовится к следующим видам профессиональной деятельности: научно-исследовательская деятельность в области химии и смежных наук; преподавательская деятельность в области химии и смежных наук.

Направленность (профиль) профессиональной деятельности: Физическая химия.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника, освоившего программу аспирантуры, универсальных компетенций УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5, общепрофессиональных компетенций ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3 и профессиональных компетенций ПК-1.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Итоговый контроль. Для контроля усвоения дисциплины учебным планом ООП предусмотрен зачет.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены: 22 часа на лекции, 4 часа на зачет и 82 часа самостоятельной работы аспирантов.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины – получение аспирантами углубленных знаний о современных теоретических и экспериментальных подходах и методах, применяемых при исследовании твердого тела, развитие приобретенных ими навыков исследования путем использования накопленных знаний в анализе и интерпретации результатов, получаемых при выполнении темы научно-квалификационной работы.

Также целью освоения дисциплины «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» является углубленное изучение теоретических основ, практических возможностей и ограничений важнейших для химиков физическо-химических подходов и методов исследования, изучение современной аппаратуры и условий проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, в том числе публикуемые в научной литературе. Аспирант должен научиться также оптимальному выбору методов для решения поставленных задач и делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

Основные задачи дисциплины:

- сформировать базовые знания и умения в области методов исследования строения и структуры соединений для подготовки к научно-исследовательской работе;
- раскрыть роль физико-химических методов исследований в работе химика;
- рассмотреть основные экспериментальные закономерности физико-химических методов исследования и установления структуры неорганических соединений;
- обеспечить овладение методологией применения физико-химических методов исследований соединений.

Задачей курса "Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела" также является выяснение вопросов, связанных с физическими теориями взаимодействия электромагнитного поля, излучения или потока частиц с молекулой в определенных условиях. В этих взаимодействиях проявляются одновременно как свойства молекул, так и характер поля или потока. Результат этого взаимодействия обусловлен изучаемыми характеристиками и параметрами молекул и конкретным видом поля, излучения или потока частиц.

Теория взаимодействия излучения с молекулой, обладающей заданными свойствами приводит к решению прямой задачи метода: каков результат взаимодействия. Однако экспериментальные исследования ставят обратную задачу: по результатам взаимодействия излучения с молекулой определить ее характеристики и параметры.

Решение обратной задачи характеризует возможность метода: его чувствительность, точность, доступность, практичность. Для определенного вида излучения не все свойства молекулы могут проявляться эффективно, а лишь часть из них. Это определяет подбор для исследования того или иного свойства молекул.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

- 2.1. Учебная дисциплина «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» является обязательной дисциплиной и входит в вариативную часть учебного плана ООП.
- 2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИХТТ УрО РАН, прошедших обучение по программам подготовки магистров или специалистов, прослушавших в высших учебных заведениях (университетах) соответствующие курсы и имея по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных учебных программах указанных уровней. В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: неорганическая химия, физическая химия, аналитическая химия, общая физика, кристаллография, квантовая химия, структурная химия.
- 2.3. Дисциплина «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по физической химии.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины «Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

1. Универсальных компетенций:

- способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовности участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке (УК-4);
- способности планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

2. Общепрофессиональных компетенций:

- способности самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовности организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

3. Профессиональных компетенций:

способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности (направленности) 02.00.04 Физическая химия (ПК-1).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут

знать:

- основные теоретические положения и принципы, лежащие в основе физико-химических методов исследований,
- основные понятия, соотношения и способы теоретического описания изучаемой физической химии,
- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в области физической химии и в междисциплинарных областях;

уметь:

- применять полученные знания при выполнении практических заданий, расчетов, осваивать вопросы, выносимые на самостоятельное изучение,
- анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов
- при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений;

владеть:

- основами математического аппарата применяемого для описания физической химии,
- навыками проведения теоретического исследования в различных областях физической химии,
- способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии, излагать материал в ясной и доступной форме,
- навыками анализа возможности создания новых методик и технологий на базе проведенных исследований,

- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов,
- навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях,
- навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в т.ч. междисциплинарного характера, возникающих в науке на современном этапе ее развития,
- навыками критической оценки эффективности различных методов и технологий научной коммуникации на государственном и иностранном языках.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование разделов и тем	Трудоемкость (в ЗЕТ)	Объем работы (в часах)	Вид учебных занятий (в часах)		
			лекции	лабораторные занятия	самостоятельная работа
1	2	3	4	5	6
Раздел 1. Дифракционные методы исследования поликристаллических материалов.					
Тема 1.1. Рентгеновская и нейтронная дифракция.		12	2		10
Тема 1.2. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ.		16	2		14
Раздел 2. Молекулярная спектроскопия в ультрафиолетовой и видимой областях спектра.					
Тема 2.1. Инфракрасная спектроскопия (ИК-спектроскопия).		4			4
Тема 2.2. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР-спектроскопия).		8	2		6
Тема 2.3. Молекулярная спектроскопия.		4			4
Раздел 3. Резонансные методы (радиочастотная область спектра).					
Тема 3.1. Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР).		6	2		4
Тема 3.2. Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).		6			6
Раздел 4. Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция, СТМ-микроскопия.					
Тема 4.1. Методы анализа поверхности.		6	2		4
Тема 4.2. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФС).		6	2		4
Тема 4.3. Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ).		8	2		6
Раздел 5. Магнетохимические методы.					
Тема 5.1. Магнетохимия: задачи, методы, аппаратура.		2			2
Тема 5.2. Основные виды магнетизма		4	2		2
Тема 5.3. Диамагнитная составляющая магнитной восприимчивости.		4	1		3
Тема 5.4. Парамагнитная составляющая магнитной восприимчивости.		4	1		3
Тема 5.5. Магнетизм ионов переходных металлов.		6	2		4
Раздел 6. Термический анализ.					
Тема 6.1. Экспериментальные методы термического анализа.		2			2
Тема 6.2. Теория, эксперимент и аппаратура термического анализа.		6	2		4
Зачет		4			
Всего по дисциплине	3	108	22		82

4.2. Содержание разделов и тем

Раздел 1. Дифракционные методы исследования поликристаллических материалов.

Тема 1.1. Рентгеновская и нейтронная дифракция. Природа возникновения рентгеновского излучения. Тормозное и характеристическое излучения. Основной закон ослабления интенсивности рентгеновских лучей. Поглощение и рассеяние рентгеновских лучей. Свойства вторичных характеристических лучей. Методы монохроматизации рентгеновского излучения. Описание кристаллической структуры вещества. Элементарная ячейка, ячейки Бравэ, индексы Миллера. Дифракция рентгеновского излучения на монокристалле и на порошковом образце. Формулы Лауэ и Вульфа-Брэгга. Обратная решетка. Методы наблюдения дифракции рентгеновских лучей.

Тема 1.2. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ. Представление и интерпретация данных рентгеновской дифракции. Базы данных стандартов порошковой дифракции. Качественный рентгенофазовый анализ поликристаллов. Идентификация вещества, в том числе для сложной смеси фаз. Полуколичественный фазовый анализ с использованием корундовых чисел. Интенсивность интерференционных максимумов и факторы её определяющие. Рассеяние рентгеновских лучей электроном. Поляризационный фактор. Рассеяние рентгеновских лучей атомом. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Структурная амплитуда. Структурный фактор. Структурный фактор для примитивной решётки, ОЦК, ГЦК. Тепловой множитель. Фактор повторяемости. Угловой множитель интенсивности (фактор Лоренца). Абсорбционный фактор. Влияние размера блоков когерентного рассеяния и механических микронапряжений в них на ширину дифракционных линий. Методы структурного анализа. Метод Дебая - Шеррера - Хелла (метод порошка). Метод Лауэ. Метод вращения кристаллов. Нейтронография: сравнительная характеристика метода по отношению к рентгенографии, преимущества и недостатки. Области применения.

Раздел 2. Колебательная и молекулярная спектроскопия.

Тема 2.1. Инфракрасная спектроскопия (ИК-спектроскопия). Квантово-механический подход к описанию колебательных частот в колебательных спектрах двухатомных молекул. Вращательные спектры. Колебания гармонического осциллятора. Правила отбора для переходов между уровнями гармонического осциллятора. Реальные колебания молекул. Уровни энергии, их классификация. Техника ИК-спектроскопии. Источники излучения, монохроматор, приемники. Приготовление образцов. Схема ИК-спектрометра.

Тема 2.2. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР-спектроскопия). Стоксовы и антистоксовы линии в спектре КР. Правила отбора активности линий в спектре КР. Сравнительная характеристика ИК-спектров и спектров КР. Аппаратура спектроскопии КР.

Применение методов колебательной спектроскопии в неорганической химии и химии твердого тела. Колебания многоатомных молекул. Число нормальных колебаний линейной и нелинейной молекул. Классификация нормальных колебаний по форме и симметрии.

Тема 2.3. Молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектрометрия в ультрафиолетовой и видимой областях спектра. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Поглощение, испускание, рассеяние. Физические основы метода. Основной закон светопоглощения (закон Бугера-Ламберта-Бера). Количественный анализ. Аппаратура и техника измерений.

Раздел 3. Резонансные методы (радиочастотная область спектра).

Тема 3.1. Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Из истории спектроскопии ЯМР. Основы ядерного магнитного резонанса.

Условие ядерного магнитного резонанса. Способы достижения условий резонанса. Уровни энергии ядра в магнитном поле. Ядерная поляризация.

Поведение магнитного момента во вращающейся системе координат. Времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации. Уравнение Блоха.

ЯМР твердых тел. Диполь-дипольное взаимодействие в выделенной паре ядер. Метод вторых моментов. Константа экранирования ядра. Природа химического сдвига линий ЯМР.

ЯМР твердых тел. Квадрупольные взаимодействия в ЯМР спектрах твердых тел. Градиент электрического поля.

Аппаратура ядерного магнитного резонанса. Чувствительность метода ЯМР. Принцип непрерывного метода наблюдения ЯМР. Основы импульсного наблюдения ЯМР. Вращение образца под магическим углом.

Структурные особенности, проявляющиеся в спектрах ЯМР. Молекулярная подвижность в твердом теле.

Тема 3.2. Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Принципы спектроскопии электронного парамагнетического резонанса. Условия возникновения ЭПР. Заселенность уровней энергии, релаксационные процессы и ширина сигнала. Сравнительная характеристика методов ЯМР и ЭПР. Системы, изучаемые методом ЭПР. Метод записи и форма резонансной линии ЭПР. Характеристики линии в спектре ЭПР: форма, ширина, интегральная интенсивность, g -фактор. Свойства g -фактора.

Спектры ЭПР ионов переходных металлов. Тонкая структура в спектрах ЭПР.

Спектры ЭПР комплексных соединений. Дополнительная СТС в спектрах ЭПР. Влияние магнитных обменных взаимодействий на спектры ЭПР. Способы снятия обменных взаимодействий - получение магниторазбавленных систем.

Спектры ЭПР точечных дефектов в твердых телах.

Блок-схема ЭПР - спектрометра, особенности эксперимента, достоинства и недостатки метода.

Раздел 4. Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция, СТМ-микроскопия

Тема 4.1. Методы анализа поверхности. Понятие поверхности. Поверхность, тонкая пленка, покрытие, объем твердого тела. Схема возникновения фотоэлектронной эмиссии. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации. Использование колебательной структуры полос для определения характера МО. Фотоэлектронные спектры молекул O_2 , NO , N_2 , H_2O . Техника анализа поверхности. Возможности фотоэлектронной спектроскопии.

Тема 4.2. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФС). Электронная спектроскопия для химического анализа (ЭСХА). Разрешающая способность метода и его возможности. Получение рентгеновских эмиссионных спектров. Схема возникновения оже-электронов. Химический сдвиг в спектрах и его интерпретация. Глубина анализа. Возможности рентгеновской спектроскопии. Количественный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная дифракция: принцип метода, приближение однократного рассеяния плоских волн. Приближение рассеяния сферических волн. Рентгеновская фотоэлектронная голография.

Тема 4.3. Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ). Суть метода. Принцип действия СТМ-микроскопа. Тестовые материалы для СТМ. Метод "атомной сборки" в СТМ-микроскопии. Сканирующая туннельная спектроскопия (СТС). СТМ-приборы.

Раздел 5. Магнетохимические методы.

Тема 5.1. Магнетохимия: задачи, методы, аппаратура. Метод магнитной восприимчивости. Единицы измерения магнитной восприимчивости. Аппаратурные методы. Силовые методы (метод Гуи, метод Фарадея, метод Квинке, метод вискозиметра). Индукционные методы. СКВИД – магнетометры.

Тема 5.2. Основные виды магнетизма. Поведение вещества во внешнем магнитном поле, магнитная индукция, магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость вещества. Природа явлений диа-, пара-, ферро- и ферримагнетизма. Диамагнетизм вещества и аддитивная схема Паскаля. Суперпарамагнетизм. Макроскопическая природа магнетизма. Спиновые стекла. Парамагнетизм Паули и диамагнетизм Ландау.

Тема 5.3. Диамагнитная составляющая магнитной восприимчивости. Формула Ланжевена. Аддитивная схема Паскаля. Магнитная анизотропия и критерий ароматичности. Идеальный диамагнетизм. Поляризационный парамагнетизм (Ван-Флека). Вычисление диамагнитной и ван-флековской составляющих магнитной восприимчивости. Формула Кирквуда.

Тема 5.4. Парамагнитная составляющая магнитной восприимчивости. Причина возникновения парамагнетизма. Закон Кюри. Эффект насыщения в парамагнетиках. Закон Кюри-Вейса. Связь константы Кюри с микроскопическими величинами.

Тема 5.5. Магнетизм ионов переходных металлов. Принципы формирования электронной структуры ионов переходных металлов. Расщепление энергетических уровней межэлектронными взаимодействиями (на примере d^2 -конфигурации). Энергия спин-орбитального взаимодействия. Расщепление энергетических уровней кристаллическим полем. Уравнение Ван-Флека. Частные случаи использования уравнения Ван-Флека. Учет спин-орбитального взаимодействия при использовании уравнения Ван-Флека. Магнитные моменты редкоземельных и переходных элементов. Магнитные свойства комплексов переходных металлов. Низкоспиновые комплексы. Спиновое равновесие.

Раздел 6. Термический анализ.

Тема 6.1. Экспериментальные методы термического анализа. Классификация термических методов анализа. Термический анализ в ряду других физико-химических методов анализа. Термогравиметрический анализ (ТГА), Дифференциально-термический анализ (ДТА) и дифференциально-сканирующая калориметрия (ДСК). Дилатометрия. Применение термического анализа для качественного и количественного анализа неорганических веществ. Исследование фазовых превращений. Оценка термостойкости. Факторы, по которым следует отдавать предпочтение той или иной экспериментальной методике. Определение "лучшего прибора" для исследований.

Тема 6.2. Теория, эксперимент и аппаратура термического анализа. Температурные шкалы. Современная температурная шкала МТШ-90, первичные и вторичные реперные точки. Температурные датчики и термометры (газовые термометры, жидкостные термометры, платиновые термометры сопротивления, термотетрия по магнитной восприимчивости, термисторы, термопары, пирометры). Термопары. Формулы для ЭДС термопары. Разновидности термопар. Таблицы ЭДС для стандартных термопар. Феномен Рунге в связи с табулированием ЭДС термопары.

Калориметрия. Теплоёмкость твёрдых тел. Закон Дюлонга-Пти. Модели теплоёмкости: классическая, Эйнштейна, Дебая, Тарасова. Связь между колебательным спектром твёрдого тела и его теплоёмкостью. Дебаевская температура. Измерения теплоёмкости методом адиабатической калориметрии. Измерения методом дифференциальной сканирующей калориметрии.

Термическое расширение. Модель ангармонизма атомных колебаний. Термодинамический подход (Льюис). Модель Грюнайзена. Термическое расширение в твёрдых телах с межатомным взаимодействием по Леннарду-Джонсу. Формула, связывающая теплоёмкость и коэффициент термического расширения твёрдого тела. Экспериментальные методы измерения линейного коэффициента термического расширения. Асимметрия дифференциальной схемы термомеханического анализатора.

Аномалии термических свойств твёрдых тел. Двухуровневая система. Эффекты типа Шоттки в теплоёмкости. Изменение энтропии системы при тепловой аномалии и её связь с вероятностью распределения атомов по энергиям. Фазовые переходы первого и второго рода. Механизмы фазовых переходов: магнитные, электрические, упорядочение-разупорядочение, пере-кристаллизация.

Химические реакции. Степень превращения и потеря массы. Дегидратация, возгонка, термическое разложение твёрдых тел. Аррениусовские координаты. Кинетические модели термического разложения. Разница между изотермическими и сканирующими измерениями. Три этапа в истории исследования кинетики термических реакций. Математическая обработка результатов реакций без использования модели (model-free kinetics).

Калибровка приборов термического анализа. Калибровка температурной шкалы (ДТА, ТМА, ТГ, дериватографы) в режиме нагревания и охлаждения. Калибровка чувствительности датчиков теплового потока ДСК. Математические методы в калибровке.

Планирование термоаналитического эксперимента. Постановка задачи. Параметры прибора. Характеристика образца. Температурный интервал и скорость нагревания. Точность результатов эксперимента.

Обработка результатов термоаналитического эксперимента. Факторы, влияющие на результаты термоаналитических измерений (скорость нагревания, масса образца, форма и размер тигля, атмосфера). «Пустой» эксперимент. Базовая линия. Параметры термоаналитических пиков (начало, конец, максимум). Правило Кирхгофа

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На аудиторных занятиях предусмотрены следующие интерактивные формы обучения в образовательном процессе:

- тематические учебные конференции (самостоятельная работа студентов);
- учебные дискуссии на заданную тему;
- индивидуальная работа аспиранта на экспериментальном оборудовании в присутствии преподавателя.

Лекционные занятия проводятся в интерактивной форме с использованием мультимедийного обеспечения (ноутбук, проектор) и технологии проблемного обучения.

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 82 часа. Самостоятельная работа проводится с целью углубления и расширения знаний по дисциплине и предусматривает следующие виды внеаудиторной работы аспирантов:

- работа с рекомендованной литературой и с Интернет-источниками с целью усвоения теоретического материала дисциплины,
- подготовка к зачету.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, аспирантам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных поисковых системах, таких как www.rambler.ru, www.yandex.ru, www.google.ru, www.yahoo.com. Каждому аспиранту рекомендуется иметь собственный рабочий кабинет на сайте Центральной научной библиотеки УрО РАН (Система "Web-кабинет ученого": <http://i.uran.ru/webcab/>).

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы: Учеб. для хим. спец. вузов. М.: Высш.шк. 1989.
2. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия: Учеб. для хим. спец. вузов. М.: Высш.шк., 1987.
3. Драго Р. Физические методы в химии. М.: Мир, 1981. Ч.1., Ч.2.

Дополнительная литература

1. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. М.: МИСИС, 2002.
2. Уманский Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников. М.: Metallurgy, 1969.
3. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Metallurgy, 1982.
4. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений, М., Высшая школа, 1989.
5. Чернышев В.В. "Определение кристаллических структур методами порошковой дифракции". // Изв. Академии наук. Серия химическая. 2001, № 12, с. 2174-2190.

6. Накамото К. ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. М.: Мир, 1995.
7. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир, 1985
8. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: КомКнига, 2006.
9. Анализ поверхности методами Оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. (Под ред. Бриггса Д., Сиха М.), М.: Мир, 1987.
10. Мазалов Л.Н. Рентгеноэлектронная спектроскопия и ее применение в химии. // Соросовский образовательный журнал, 2000, №4, с. 37-44.
11. Hüfner S. Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications. New-York: Springer, 2003.
12. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy. (Ed. Mullenberg G.E.), Minnesota: Perkin-Elmer Corporation, 189 p.
13. Вудраф Д., Делчар Т.. Современные методы исследования поверхности. М.: Мир, 1989.
14. В. И. Нефедов. Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений. Справочник. М.: Химия, 1984.
15. Немошкаленко В. В., Алешин В. Г.. Электронная спектроскопия кристаллов. Киев: Наукова Думка, 1976.
16. Зигбан К., Нордлинг К., Фальман А., Нордберг Р., Хамрин К., Хедман Я., Йоханссон Г., Бергмарк Т., Карлссон С., Линдгрэн И., Линдберг Б. Электронная спектроскопия. М.: Мир, 1971.
17. Шалаева Е.В., Кузнецов М.В. Рентгеновская фотоэлектронная дифракция. Возможности структурного анализа поверхности (обзор). Журнал структурной химии, 2003, Т.44, №3, 518-552.
18. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород: Институт физики микроструктур РАН, 2004.
19. Эдельман В.С. Развитие сканирующей туннельной и силовой микроскопии. // Приборы и техника эксперимента, № 1, с. 24 – 42 (1991).
20. Бахтизин Р.З., Галлямов Р.Р. Физические основы сканирующей зондовой микроскопии. Уфа: РИО БашГУ, 2003.
21. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. Новосиб. Гос. Ун-т. Новосибирск, 2010.
22. Лундин А.Г., Зорин В.Е. Ядерный магнитный резонанс в конденсированных средах. Успехи физических наук. 2007, Т. 177, №10, С. 1107-1132.
23. Москалев А.К. Ядерный магнитный резонанс в твердом теле. Курс лекций., Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2007.
24. Блюмих Б. Основы ЯМР. М: Техносфера, 2007.
25. Калинин В.Т., Ракитин Ю.В. Введение в магнетохимию. М.: Наука, 1980.
26. Ракитин Ю.В., Калинин В.Т. Современная магнетохимия. С.Петербург: Наука, 1984.
27. Карлин Р.Л. Магнетохимия. М.: Наука, 1989.
28. Селвуд П. Магнетохимия. М.: ГИФМЛ, 1958.
29. Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: 1971..
30. Дорфман Я.Г. Диамагнетизм и химическая связь. М., ГИФМЛ, 1961.
31. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия.1976.
32. Шестак Я. Теория термического анализа. М.: Мир, 1987
33. Хеммингер, Г. Хене. Калориметрия. Теория и практика. М.: Химия, 1990
34. Уэндландт У. Термические методы анализа. М.: Мир, 1978
35. Новикова С.И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины "Современные физико-химические подходы к исследованию твердого тела" предполагает использование следующего экспериментального оборудования и программного обеспечения, имеющегося в ИХТТ УрО РАН.

Оборудование:

- спектрофотометр UV-VIS-NIRUV-3600 (Shimadzu) для изучения спектров поглощения в диапазоне длин волн 185 – 3500 нм;

- спектрометр на базе монохроматора МДР-204 (ЛОМО ФОТОНИКА) с набором фотоприемных устройств для измерения эмиссионных спектров в диапазоне длин волн 230 – 3500 нм, возбуждаемых излучениями от маломощной ксеноновой лампы OSRAMXBO150W/1, светодиодных (LED) модулей с эмиссией в диапазоне длин волн от 325 до 400 нм или лазерных диодных (LD) модулей с длинами волн 808, 980 и DPSS - 1064 нм;

- спектрофлюориметр CARY ECLIPSE (Varian) с импульсной ксеноновой лампой (длительность импульса - 2мкс, мощность в импульсе – 75 кВт) для измерений в диапазоне длин волн 200 – 850 нм и с возможностью использования в качестве внешних источников возбуждения, подключаемые через оптоволоконные линии диодные лазеры и светодиоды;

- спектроколориметр ТКА-ВД для определения цветовых координат (CIE) люминофоров;

- оптическая сфера полного внутреннего отражения AvaSphera – 50 –REFL (AvantesBV) для определения абсолютного квантового выхода люминесценции, работающая совместно со спектрофлюориметром CARY ECLIPSE (Varian);

- электронный спектрометр ESCALABMKII для проведения исследований методами РФЭС и Оже-спектроскопии;

- импульсный ЯМР спектрометр Agilent VNMR 400 с приставкой вращения под магическим углом (MAS);

- ЯМР-спектрометр широких линий на базе модифицированного спектрометра TESLA BS 567 A;

- магнитометр CryogenicVSM-5T (2-700К, поле до 50 кЭ);

- установка для измерения магнитной восприимчивости методом Фарадея в полях до 12 кЭ, в интервале температур 300-1250 К;

- ИК Фурье спектрометр Vertex 80 (Брукер) с КР приставкой RAMII;

- ЭПР спектрометр CMS 8400;

- автоматический рентгеновский дифрактометр STADI-P (STOE, Germany), предназначенный для проведения структурных исследований в температурном интервале от 90К до 1273К (позиционно-чувствительный и сцинтилляционный детекторы, полное математическое обеспечение, включая программы для полнопрофильного анализа – GSAS, EXPO и рентгенофазового анализа –WINXPOW + порошковый дифракционный файл PDF2).

Программное обеспечение:

- библиотека (база) структурных данных неорганических веществ ICSD (Karlsruhe, Германия) версии 2015-1. Версия программы для работы с этой базой FindIt v 1.9.6;

- персональные компьютеры с установленным системным программным обеспечением (операционная система Windows, офисный пакет Microsoft Office);

- серверные операционные системы Windows Server - Standard.