

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт катализа им. Г.К. Борескова  
Сибирского отделения Российской академии наук

УТВЕРЖДАЮ



ВРИО директора ИК СО РАН

чл.-корр. РАН

В.И. Бухтияров

« 21 » мая 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Физические методы исследования катализаторов**

Направление подготовки: 04.06.01 – Химические науки

Направленность подготовки: 02.00.04 - Физическая химия

Уровень образования: подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

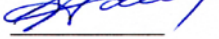
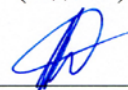
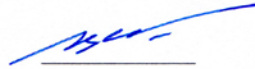
Новосибирск 2015

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденный Приказом Минобрнауки РФ от 30.07.2014 № 869.
2. Паспорт научной специальности 02.00.04 – Физическая химия (разработанный экспертами ВАК Минобрнауки России в соответствии с Номенклатурой специальностей работников, утвержденной приказом Минобрнауки России от 25.02.2009 г. № 59).
3. Программа-минимум кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Составители рабочей программы:

<u>Заведующий лабораторией, д.х.н., проф.</u> (должность, ученое звание, ученая степень)	 (подпись)	<u>Е.П. Талзи</u> (Ф.И.О.)
<u>Заведующий лабораторией, д.х.н., проф.</u> (должность, ученое звание, ученая степень)	 (подпись)	<u>Е.А. Паукштис</u> (Ф.И.О.)
<u>Заведующий лабораторией, д.ф.-м.н., проф.</u> (должность, ученое звание, ученая степень)	 (подпись)	<u>С.В. Цыбуля</u> (Ф.И.О.)

Рабочая программа утверждена на заседании Ученого совета ИК СО РАН

«14» 05 2015 г., протокол № 08

Ученый секретарь, к.х.н.

  
(подпись)

А.А. Ведягин  
(Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по научной работе, д.х.н.

  
(подпись)

Мартьянов О.Н.  
(Ф.И.О.)

## 1. Цели освоения дисциплины

**Целевая установка курса** - овладение аспирантами теоретическими знаниями по современным методам изучения фазового состава, атомной структуры, микроструктуры и свойств поверхности твердых катализаторов, а также строения гомогенных катализаторов в растворе; изучение химии каталитических превращений на поверхности твердых фаз и в растворах.

### Основные задачи дисциплины:

- познакомить с особенностями применения методов рентгеновской дифракции, оптической спектроскопии и магнитно-резонансных методов для изучения явлений гетерогенного и гомогенного катализа;
- привить творческое отношение к планированию исследований в области изучения строения гетерогенных и гомогенных катализаторов, а также механизма протекающих с их участием превращений;
- научить квалифицированно анализировать литературные источники с целью получения объективной картины по состоянию проблемы поставленной в аспирантской работе;
- научить конкретным методикам применения физических методов исследования для исследования катализаторов;
- познакомить с учебной и научной литературой, а также ключевыми достижениями в области применения физических методов к исследованию гомогенных и гетерогенных катализаторов.

## 2. Место дисциплины в структуре программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 - Химические науки, направленность (специальность) 02.00.04 - Физическая химия.

Дисциплина относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы аспирантуры. Преподается на первом/втором курсах.

Требования к первоначальному уровню подготовки обучающихся для успешного освоения дисциплины:

- базовые знания по химии твердого тела, кристаллохимии, природе электромагнитного излучения разных диапазонов, физике взаимодействия электромагнитного излучения с веществом, математике (математическая статистика, фурье-анализ, теория групп);
- теоретические основы гомогенного и гетерогенного катализа;
- теоретические основы квантовой теории строения вещества.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций.

Универсальные компетенции:

УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
------	--

УК -3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач;
-------	---

Общепрофессиональные компетенции:

ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-3	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования.

Профессиональные компетенции:

ПК-1	Способность экспериментально определять и рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ
ПК-2	Способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных превращений, исследовать природу каталитического действия и промежуточных соединений реагентов с катализатором с использованием физических методов исследования
ПК-3	Способность устанавливать связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

**Знать:**

- теоретические основы методов исследования состава и структуры катализаторов;
- конкретные методики определения фазового состава, атомной структуры, микроструктуры, структуры и свойств поверхности твердых катализаторов, строения гомогенных катализаторов в растворах.

**Уметь:**

- составить программу комплексного физико-химического исследования гетерогенных и гомогенных катализаторов;
- выполнять намеченные работы и руководить ими;
- проводить обработку полученной информации, составлять отчетные материалы.

**Владеть навыками:**

- использования физических методов исследования в части изучения структуры и свойств гомогенных и гетерогенных катализаторов;
- анализа и непротиворечивого комбинирования данных разных физических методов исследования катализаторов;
- использования учебной и современной научной литературы для проведения исследований.

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

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа

	Объём часов / зачетных единиц
<b>Всего</b>	<b>144/4</b>
<b>Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)</b>	<b>40</b>
<b>в том числе:</b>	
<b>лекции</b>	<b>32</b>
<b>семинары</b>	<b>8</b>
<b>практические занятия*</b>	
<b>Самостоятельная работа аспиранта (всего)</b>	<b>104</b>
<b>Вид контроля по дисциплине:</b> Текущий контроль Рубежный контроль Зачет (Итоговый контроль)	

\*Практические занятия предусмотрены при выполнении научных исследований.

#### 5. Разделы дисциплины и виды занятий

	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семинар	СРА	Всего
1.	Основы ИК, КР и УФ-Вид спектроскопии	2				6	8
2.	Фазовый анализ катализаторов по данным ИК, КР и УФ-Вид спектроскопии	2			2	8	12
3.	Количественные измерения методами оптической спектроскопии	2				6	8
4.	Изучение механизмов каталитических реакция методом in-situ ИК-Фурье спектроскопии	2				8	12
5.	Принципы электронной микроскопии	2			2	8	12
6.	Интерпретация колебательных спектров на основе квантовохимических расчетов	2				6	8
7.	Основы ЯМР и ЭПР спектроскопии	2				6	8
8.	Аппаратура для регистрации ЯМР и ЭПР спектров	2				6	8
9.	Импульсная ЯМР спектроскопия	2				6	8
10.	ЭПР спектроскопия	2				6	8
11.	Применения ЯМР спектроскопии в катализе	2			2	6	10
12.	Основы теории рассеяния рентгеновских лучей	2				6	8
13.	Принципы рентгенофазового анализа. Высокотемпературная рентгенография и рентгенография in situ.	2				6	8
14.	Рентгеноструктурный анализ поликристаллов	2				6	8
15.	Изучение структуры ультрадисперсных и частично разупорядоченных объектов	2			2	8	10
16.	Метод радиального распределения атомов	2				6	8

		32		8	104	144
--	--	----	--	---	-----	-----

## 6. Содержание дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
Лекции		
1	Основы ИК, КР и УФ-Вид спектроскопии	Предмет дисциплины. Физические основы взаимодействия электромагнитного излучения с веществом в ИК области. Аппаратура для регистрации колебательных спектров. Устройство и характеристики современных спектрометров. Физика рассеяния УФ-Вид-Бл.ИК излучения молекулами и конденсированным веществом. Устройство КР спектрометров. Электронная структура соединений переходных элементов и органических соединений и поглощение света в УФ-Вид диапазонах. Устройство УФ-Вид спектрометров.
2.	Фазовый анализ катализаторов по данным ИК, КР и УФ-Вид спектроскопии	Фазовый анализ объема катализаторов методами ИК и КР спектроскопии. Методики измерения ИК и КР спектров объема катализаторов, преодоление проблемы нагревания образцов лазерным излучением, низкотемпературная и высокотемпературная спектроскопия. Фазовый анализ поверхности катализаторов методами ИК и КР спектроскопии. Особенности изучения поверхности, метод спектральных зондов. Анализ электронного состояния катионов переходных элементов в ходе приготовления катализаторов по данным УФ-Вид спектроскопии. Спектры индивидуальных комплексов в твердом виде и в растворах, изменение спектров в ходе пропитки, сушки и прокаливания катализаторов
3.	Количественные измерения методами оптической спектроскопии	Физические основы закона Бугера-Ламберта-Бера. Природа отклонений от этого закона. Количественные измерения методикой диффузного отражения.
4.	Основы методов in-situ ИК-Фурье спектроскопии	Методология изучения механизмов каталитических реакций методом in-situ ИК-Фурье спектроскопии. Аппаратурное оформление исследований. Сравнение динамических и статических методик.
5.	Принципы электронной микроскопии	Процессы, происходящие при взаимодействии электронов с веществом. Просвечивающая электронная микроскопия. Дифракция электронов Сканирующая электронная микроскопия. Энергодисперсионная спектроскопия. Спектрометрия потерь энергии электронов.
6.	Интерпретация колебательных спектров на основе квантовохимических расчетов	Роль квантовой химии в современных методах интерпретации спектров адсорбированных молекул и механизмов каталитических реакций. Интерпретация спектров в условиях недостаточности спектральной информации. Расчеты спектров методами квантовой химии. Метод скалирующей матрицы. Примеры наиболее значительных достижений при комбинировании квантовой химии и ИК спектроскопии. Структура аминоккомплексов на поверхности катализаторов. Адсорбция метанола на поверхности оксидов

		кремния и алюминия
7.	Основы ЯМР и ЭПР спектроскопии	Электронный и ядерный магнитный моменты в магнитном поле. Уравнения Блоха. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновый гамильтониан.
8.	Аппаратура для регистрации ЯМР и ЭПР спектров	Устройство и характеристики современных спектрометров ЯМР и ЭПР
9.	Импульсная ЯМР спектроскопия	Векторная модель ЯМР. Химические сдвиги и спин-спиновое взаимодействие в импульсном эксперименте. Временное и частотное представление сигнала ЯМР. Спиновое эхо. Спиновая релаксация. Механизмы релаксации. Методики определения $T_1$ и $T_2$ . Декаплинг. Редактирование спектров $^{13}\text{C}$ ЯМР с помощью спинового эхо. Перенос поляризации. Эффект Оверхаузера. ЯМР твёрдого тела. Вращение под магическим углом. Кросс поляризация.
10.	ЭПР спектроскопия	Интерпретация спектров ЭПР поликристаллических образцов. Проявление сверхтонкого и дополнительного сверхтонкого взаимодействия в спектрах ЭПР. Теоретическое моделирование спектров ЭПР поликристаллических образцов. Примеры применения ЭПР спектроскопии для изучения строения катализаторов и химических превращений, протекающих с их участием.
11	Применения ЯМР спектроскопии в катализе	Примеры применения ЯМР спектроскопии для изучения строения катализаторов и химических превращений, протекающих с их участием.
12.	Основы теории рассеяния рентгеновских лучей	Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Условия Вульфа-Брэггов и Лауэ. Индексы Миллера. Обратная решетка. Структурная амплитуда и интенсивность дифракционного максимума.
13.	Принципы рентгенофазового анализа. Высокотемпературная рентгенография и рентгенография in situ.	Различные схемы дифракционного эксперимента. Аппаратура для дифракционных исследований. Современные типы дифрактометров, камеры для температурных исследований в различных газовых средах. Рентгенофазовый анализ, качественный и количественный. База данных PDF.
14.	Рентгеноструктурный анализ поликристаллов	Принципы рентгеноструктурного анализа. Рентгеноструктурный анализ поликристаллических образцов: определение и уточнение параметров решетки, координат атомов, тепловых параметров. Метод Ритвельда.
15.	Изучение структуры ультрадисперсных и частично разупорядоченных объектов	Особенности рассеяния на кристаллитах малых размеров. Причины уширения дифракционных пиков. Понятие области когерентного рассеяния. Формула Дебая-Шеррера и методика Вильямсона-Холла. Дифракция на одномерно разупорядоченных кристаллах. Объекты, содержащие дефекты упаковки, дефекты смещения слоев; турбостратные структуры. Дифракционные эффекты, вызываемые корреляциями в распределении планарных дефектов. Моделирование дифракционных картин от ультрадисперсных систем с использованием функции Дебая.
16.	Метод радиального распределения атомов	Определение ближнего порядка в распределении атомов по дифракционным данным путем фурье-анализа дифракционной картины. Сочетание метода радиального распределения электронной плотности с прямым моделированием дифракционных картин по формуле Дебая.

## 7. Самостоятельная работа аспирантов

**Цель самостоятельной работы** – закрепление, углубление и приобретение навыков применения теоретических знаний в практической работе, умения целенаправленно творчески работать с учебной, научной специальной литературой, составлять рефераты.

В самостоятельную работу аспирантов включается также подготовка к текущему и рубежному контролю, сдаче зачета.

На самостоятельное изучение выносятся следующие темы и рекомендуется литература:

### ***Оптическая спектроскопия:***

1. Метод спектральных зондов [1, 2,].
2. Спектроскопия комбинационного рассеяния для изучения фазового состава [1, 5, 6].
3. Изучение кислотности поверхности [1, 2, 3,4].

[1] Паукштис Е.А. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе, часть 1, часть 2. Издательство Института катализа, Новосибирск. 2011,2013

[2] Davydov A., Molecular spectroscopy of oxide catalyst surfaces. Chichester: Willey,2003

[3] Паукштис Е.А. «Применение ИК спектроскопии в гетерогенном кислотно-основном катализе. Новосибирск, Наука 1992.

[4] Давыдов А.А. «ИК спектроскопия адсорбированных молекул на окислительных катализаторах», Новосибирск, Наука, 1982/

[5] Шмит В., Оптическая спектроскопия для химиков и биологов, Техносфера, Москва, 2007, 368 с.

[6] Пентин Ю.А., Курамшина Г.М., Основы молекулярной спектроскопии, Мир. Москва. 2008, 398 с

### ***Спектроскопия магнитного резонанса***

1. Проявление химического обмена в спектрах ЯМР [1, 2].
2. Теоретическая оценка значений g-тензора комплекса титана(III) в различных кристаллических полях [1].
3. ЭПР спектр атома водорода [1].

[1] Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.

[2] Воронов В. К., Сагдеев Р. З. Основы магнитного резонанса. Иркутск: Вост.-Сиб. кн. изд. 1995.

### ***Электронная микроскопия***

1. Источники электронов. Источник с термоэлектронной эмиссией. Автоэмиссионные источники.
2. Фазовый контраст в просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения.
3. Моделирование электронномикроскопических изображений

[1] Эгертон Р.Ф. Физические принципы электронной микроскопии. М.: Техносфера. 2010г.



## ***Рентгенография и рентгеноструктурный анализ***

1. Влияние дефектов упаковки на дифракционные картины металлов [1]
2. Особенности дифракции от 3D когерентных наноструктур на примере низкотемпературных форм оксида алюминия [1].
3. Высокотемпературная рентгенография в применении к изучению химических и фазовых превращений в сложных оксидах [2].
4. Принципы EXAFS спектроскопии [3].

[1] Цыбуля С.В., Черепанова С.В. Введение в структурный анализ нанокристаллов. Новосибирск: НГУ, 2008. - 92 с.

[2] Рентгенография катализаторов в контролируемых условиях температуры и среды /Под ред. Л.М.Плясовой. Новосибирск, ИК СО РАН, 2011 г.

[3] Д.И.Кочубей, EXAFS спектроскопия катализаторов, Новосибирск, 1992

## **8. Оценочные средства для контроля успеваемости и аттестации по итогам освоения дисциплины. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **8.1. Вопросы к текущему контролю**

#### **Раздел «Оптическая спектроскопия»**

Тема: «Физические основы взаимодействия электромагнитного излучения с веществом»

- 1 Что такое длина волны и волновое число?
- 2 Что такое поглощение, и в каких единицах оно измеряется?
- 3 Коэффициент экстинкции и уравнение Бугера-Ламберта-Бера?
- 4 Что такое Рамановская спектроскопия?
- 5 Число колебаний линейных и нелинейных молекул в зависимости от числа их атомов?
- 6 Причина наблюдения УФ-Вид спектров для комплексов переходных металлов?
- 7 Как УФ-вид спектры связаны с электронной структурой органических молекул?
- 8 Что такое валентные и деформационные колебания?
- 9 Отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера?
- 10 Что такое резонанс Ферми?

Тема: «Устройство и принципы работы оптических приборов»

- 1 Классификация приборов по спектральному диапазону?
- 2 Что такое интерферометр Майкельсона?
- 3 Что такое Фурье преобразование?
- 4 Принцип действия фотоумножителя?
- 5 Что такое методика диффузного отражения?

Тема: «Изучение свойств поверхности и химических реакций на поверхности»

- 1 Что такое метод спектральных зондов?
- 2 Назовите наиболее часто используемые молекулы зондов?
- 3 Как определяется сила кислотных центров?
- 4 Назовите основные этапы проведения исследований механизмов каталитических

реакций на поверхности катализаторов методом ИКС?

- 5 Какие условия корректны для изучения механизмов реакции методом in-situ ИКС?
- 6 Почему для изучения кислотности используется низкотемпературная адсорбция CO?

Тема: «Интерпретация колебательных спектров адсорбированных молекул»

- 1 Что такое метод сравнения?
- 2 Зачем нужен метод скалирующей матрицы?
- 3 Что представляет из себя метод физического моделирования интермедиатов?

Тема: «Современные достижения оптической спектроскопии для изучения катализа»

- 1 Как идентифицировать карбениевые ионы на поверхности?
- 2 Что такое водородная связь?
- 3 Строение протонных кислотных центров цеолитов?
- 4 Строение Льюисовских кислотных центров цеолитов?
- 5 Строение Льюисовских кислотных центров и оксидов алюминия?

### **Раздел «Спектроскопия магнитного резонанса»**

1. Что такое g-фактор, что такое химический сдвиг. Анизотропия g-фактора и химического сдвига. Характерные g-фактора для радикалов и комплексов переходных металлов с  $S = 1/2$ .
2. Форма линий ЭПР и ЯМР поликристаллических образцов. Определение главных значений тензора химического сдвига и g-фактора из экспериментальных спектров.
3. Связь величины g-фактора с параметрами расщепления d-орбиталей в кристаллическом поле и константой спин орбитального взаимодействия.
4. Уравнение Блоха. Что такое  $T_1$  и  $T_2$ . Почему сигнал ЯМР имеет лоренцеву форму с шириной  $1/T_2$ .
5. Эффект Оверхаузера. Величина эффекта. Как из данных по эффекту Оверхаузера определить структуру молекулы.
6. Что такое декаплинг.
7. Что такое  $90^\circ$  импульс. Как часто и как долго необходимо оцифровывать спад свободной индукции. Измерение  $T_1$  и  $T_2$ .
8. Перенос поляризации. Селективный перенос поляризации. Процедура INEPT, объяснить на векторной модели принципы работы.
9. Как с помощью J – модуляции различить  $CH_2$  и  $CH$  атомы углерода.
10. Основные принципы двумерной J - спектроскопии и двумерной корреляционной спектроскопии. Уметь анализировать простые спектры.
11. Вращение под магическим углом. Для чего нужно вращение и какова должна быть его скорость.
12. Кросс-поляризация. Соотношение Хартмана Хана.

### **Раздел «Рентгенография и рентгеноструктурный анализ»**

1. Условия дифракции по Брэггу и по Лауэ.
2. Что такое индексы Миллера?
3. Формула структурной амплитуды.
4. Основные схемы дифракционного эксперимента.

5. Как выполняется рентгенофазовый анализ поликристаллических образцов?
6. Чем определяется уширение рентгеновских дифракционных пиков?
7. Формула Селякова-Шеррера.
8. Как сказывается наличие дефектов упаковки на дифракционных картинах металлов с гцк структурой?
9. Основные методики количественного рентгенофазового анализа.
10. Как можно установить ближний порядок в расположении атомов по данным рентгеновской дифракции?

## 8.2. Вопросы к зачету (итоговому контролю знаний)

### Раздел «Оптическая спектроскопия»

1. Волновое число, длина волны.
2. Устройство и принцип работы ИК-Фурье спектрометра.
3. Устройство и принцип работы КР-спектрометра.
4. Устройство и принцип работы УФ-вид спектрометра.
5. Устройство и принцип работы оборудования для регистрации люминесценции.
6. Способы преодоления нагрева образцов при регистрации КР спектров.
7. Оптические материалы прозрачные для ИК излучения.
8. Вывести закон Бугера-Ламберта-Бера.
9. Описать условия корректного применения метода спектральных зондов.
10. Вывести закон связывающий число колебаний в молекуле с ее геометрией и числом атомов.
11. Представить число и типы колебаний простейшей органической молекулы.
12. Предложить программу исследования механизма реакции окисления пропилена на оксидном катализаторе.
13. Определить число типов кислотных центров по предложенному спектру адсорбированного СО.
14. Предложить методику измерения теплоты адсорбции СО на Льюисовском кислотном центре.
15. Найти ошибки, допущенные при регистрации предложенного спектра.
16. Определить концентрацию компонента реакционной смеси по представленному в шкале пропускания ИК спектру.

### Раздел «Спектроскопия магнитного резонанса»

1. Электронный и ядерный магнитный моменты в магнитном поле. Уравнения Блоха. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновый гамильтониан.
2. Устройство и характеристики современных спектрометров ЯМР и ЭПР.
3. Форма линий ЭПР и ЯМР поликристаллических образцов. Определение главных значений тензора химического сдвига и g-фактора из экспериментальных спектров.
4. Векторная модель ЯМР. Химические сдвиги и спин-спиновое взаимодействие в импульсном эксперименте. Эффект Оверхаузера.
5. Перенос поляризации. Селективный перенос поляризации. Процедура INEPT, объяснить на векторной модели принципы работы.
6. Интерпретация спектров ЭПР поликристаллических образцов. Проявление сверхтонкого и дополнительного сверхтонкого взаимодействия в спектрах ЭПР. Теоретическое моделирование спектров ЭПР поликристаллических образцов.

7. Основные принципы двумерной J - спектроскопии и двумерной корреляционной спектроскопии.
8. Вращение под магическим углом.
9. Кросс-поляризация. Соотношение Хартмана Хана.
10. Применения ЯМР спектроскопии в катализе

#### **Раздел «Электронная микроскопия»**

1. Процессы, происходящие при взаимодействии электронов с веществом.
2. Изображение и контраст в электронной микроскопии.
3. Принципы просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии.
4. Особенности дифракции электронов.
5. Энергодисперсионная спектроскопия и спектроскопия потерь энергии электронов.

#### **Раздел «Рентгенография и рентгеноструктурный анализ»**

1. Физические основы рентгеновской дифракции.
2. Основные уравнения рентгеновской дифракции.
3. Основные схемы дифракционного эксперимента.
4. Устройство современных порошковых дифрактометров.
5. Принципы качественного и количественного рентгенофазового анализа.
6. Уточнение кристаллических структур по порошковым дифракционными данным. Алгоритм расчета дифракционных картин от идеальных поликристаллов. Метод Ритвельда.
7. Особенности дифракции на объектах нанокристаллических размеров. Формула Селякова-Шеррера.
8. Влияние нарушений кристаллической структуры на дифракцию поликристаллических образцов.
9. Моделирование дифракционных картин от объектов с 1D беспорядком.
10. Метод радиального распределения атомов.

#### **8.3. Рекомендуемая литература Основная**

- 1 Отто М. Современные методы аналитической химии 3-издание. Техносфера. М.2008 г.
- 2 Паукштис Е.А. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе, часть 1, часть 2. Издательство Института катализа, Новосибирск. 2011,2013.
- 3 Davydov A., Molecular spectroscopy of oxide catalyst surfaces. Chichester: Willey,2003.
- 4 Степанов А. Г., Талзи Е. П. Спектроскопия ЯМР. Новосибирск: Изд. НГУ, 2012.
- 5 Цыбуля С.В., Черепанова С.В. Введение в структурный анализ нанокристаллов. Новосибирск: НГУ, 2008. - 92 с.
- 6 Эгертон Р.Ф. Физические принципы электронной микроскопии. М.: Техносфера. 2010 г.

#### **Дополнительная:**

- 7 Резвухин А. И. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения. Новосибирск: Изд. НГУ, 1979.

- 8 Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1973.
- 9 Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
- 10 Степанов А. Г. , Талзи Е. П. ЯМР-спектроскопия. Новосибирск: Изд. НГУ, 1997.
- 11 Брыляков К. П. Основы импульсной ЯМР спектроскопии: Изд. НГУ, 2002.
- 12 Талзи Е. П. Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе (курс лекций) Издательский отдел Института катализа, Новосибирск, 2002.
- 13 Паукштис Е.А. «Применение ИК спектроскопии в гетерогенном кислотном катализе. Новосибирск, Наука 1992.
- 14 Давыдов А.А. «ИК спектроскопия адсорбированных молекул на окислительных катализаторах», Новосибирск, Наука, 1982.,
- 15 Шмит В., Оптическая спектроскопия для химиков и биологов, Техносфера, Москва, 2007, 368 с.
- 16 Пентин Ю.А., Курамшина Г.М., Основы молекулярной спектроскопии, Мир. Москва. 2008, 398 с.
- 17 Громилов С.А. Введение в рентгенографию поликристаллов. Учеб.-метод. пособие. Новосибирск: НГУ, 2009. – 54 с.
- 18 Рентгенография катализаторов в контролируемых условиях температуры и среды /Под ред. Л.М.Плясовой. Новосибирск, ИК СО РАН, 2011 г.
- 19 Д.И.Кочубей, EXAFS спектроскопия катализаторов, Новосибирск, 1992
- 20 Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир. 1968.

#### **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

- аудиторный фонд ИК СО РАН, ноутбук, мультимедиа проектор, экран.
- Компьютерный класс ИК СО РАН, электронно-вычислительные машины, оснащенные необходимым прикладным и специализированным программным обеспечением.
- Рабочие места с выходом в интернет и внутреннюю сеть ИК СО РАН.
- Приборный фонд ИК СО РАН.
- Библиотечный фонд, информационно-аналитический центр ИК СО РАН.
- Учебные материалы на сайте ИК СО РАН [www.catalysis.ru](http://www.catalysis.ru) (Раздел Образование).

#### **10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:**

В процессе изучения дисциплины выполняются входной, текущий, рубежный и итоговый контроль знаний.

Входной контроль проводится для определения первоначального уровня подготовки обучающихся.

Текущий и рубежный контроль изучения дисциплины выполняется в форме вопросов к аспирантам в ходе лекций, консультаций и отчетов аспирантов по научным исследованиям в области катализа. Цель текущего и рубежного контроля заключается в выработке у аспиранта необходимости самостоятельной работы по освоению материала дисциплины.

Итоговый контроль выполняется в форме зачета. Цель итогового контроля – проверка знаний и умений, предусмотренных целями и задачами изучения дисциплины, понимание взаимосвязей различных ее разделов и связей со знаниями некоторых разделов естественнонаучных, общепрофессиональных и специальных дисциплин. Итоговый контроль проводится после освоения дисциплины в форме письменных и устных ответов на вопросы по лекционной и практической части курса.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ**

за \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_ учебный год