

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Избранные главы химического материаловедения

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Химия современных материалов и технологий

Форма обучения
Очная

Квалификация
химик-исследователь

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

БК-1 Способен действовать самостоятельно в условиях неопределенности при решении профессиональных задач и брать на себя ответственность за последствия принятых решений.

БК-2 Способен использовать научные методы для решения профессиональных задач.

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных научных приборов.

ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских и/или производственных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук.

ПК-2 Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИБК 1.2 Умеет принимать наиболее эффективные решения в условиях ограничения информации и ресурсов

ИБК 2.1 Знает основные методы научных исследований

ИБК 2.2 Умеет выстраивать систематическую и логическую цепочку анализа и принимаемых решений в контексте задачи профессиональной деятельности

ИОПК 1.1 Знает основные теоретические положения, экспериментальные и расчетные методы, применяемые в выбранной области химии

ИОПК 1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

ИОПК 1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов

ИОПК 1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 2.1 Знает основные требования к методам обработки и представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 2.2 Умеет анализировать, интерпретировать и обобщать данные, представленные в литературе и полученные в результате проведенных исследований в избранной области химии или смежных наук

ИПК 1.3 Умеет использовать современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук, применяя взаимодополняющие методы исследования

ИПК 2.2 Умеет производить оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов

2. Задачи освоения дисциплины

– формирование компетенции прогнозирования свойств твердого вещества в зависимости от его строения;

– формирование и совершенствование компетенции¹, необходимых для исследования термического поведения веществ и материалов и структуры твердых тел дифракционными методами;

– формирование и совершенствовании компетенций, связанных с разработкой и производством лекарственных средств.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Первый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 24 ч.

-практические занятия: 24 ч.

в том числе практическая подготовка: 24 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Химия твердого тела

Основные понятия и предмет изучения химии твердого тела. Кристаллические решетки. Химический и физический подход к описанию природы твердого вещества. Реальные кристаллы. Химические и физические свойства твердых тел. Поверхность твердого тела. Факторы, определяющие реакционную способность твердых тел. Методики in-situ синхротронных исследований поверхности на зарубежных источниках СИ. Твердофазные реакции.

Тема 2. Современные методы исследования

Основы кинематической теории рассеяния рентгеновский лучей. Экспериментальная техника порошковой дифракции. Рентгенофазовый анализ поликристаллов. Уточнение кристаллических структур по методу Ритвельда. Другие методы структурного исследования.

Тема 3. Актуальные вопросы материаловедения в медицине.

Качество лекарственных средств и факторы его определяющие. Обращение лекарственных средств и инструменты ее регулирования. 3 История появления, развития и содержание стандартов надлежащей производственной практики. Система государственного контроля качества, эффективности и безопасности лекарственных средств. Принципы и правила надлежащей лабораторной и клинической практик. Фармацевтическая разработка. Регистрация лекарственных средств. Факторы, влияющие

на биодоступность лекарственных средств. Методы и инструменты определения биодоступности лекарственных. Лекарственные формы и перспективы их развития.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, решения зада, представления докладов, тестов по лекционному материалу, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в первом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть представляет собой тест из 10 вопросов, проверяющих ИОПК-1.2, ИОПК-1.2. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных.

Вторая часть содержит вопрос, проверяющий ИОПК-1.3, ИОПК-1.4, ИОПК-2.1, ИОПК-2.2, ИПК-1.3, ИПК-2.2. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

Примерный перечень тестовых вопросов

1. Факторы, учитываемые в методе Ритвельда, которые могут влиять на повышение фона

- A. недостаточная кристалличность исследуемой пробы
- B. отсутствие аморфной составляющей в изучаемом образце
- C. высокосимметричная структура

2. Интегральная ширина профиля дифракционной линии обратно пропорциональна

- A. размеру кристаллитов
- B. длине волны рентгеновского излучения
- C. коэффициенту Шерера

3. Вторичный монохроматор обеспечивает разделение

- A. $K\alpha$ и $K\beta$ линий
- B. $K\alpha_1$ и $K\alpha_2$ линий
- C. $K\alpha$ и $K\gamma$ линий

4. К симморфным пространственным группам относятся

- A. $Fm\bar{3}m$
- B. $P6mm$
- C. $P6cc$
- D. $C2/c$
- E. $P6322$

5. В символике Шенфлиса плоскость перпендикулярная главной оси обозначается буквой

- B. h
- C. v
- D. d
- E. s

6. Эффективность инструкции по контролю выполнения корректирующих и предупреждающих мероприятий, а также по определению необходимости проведения повторной аттестации (испытаний) должна быть проверена

- A. уполномоченным лицом
- B. в процессе самоинспекций

- В. инспектором по GMP
- Г. инспектором Гостехнадзора

7. Предприятие-производитель должно обеспечить обучение
- А. всех сотрудников, занятых производством или контролем качества
 - Б. сотрудников, занятых производством или контролем качества, деятельность которых может влиять на качество продукции
 - В. всех сотрудников предприятия
 - Г. уполномоченных лиц и руководителей ОКК
8. Курение, прием пищи или питье, жевание резинки, а также хранение пищевых продуктов, напитков, табачных изделий и личных лекарственных средств запрещается
- А. на территории всего предприятия
 - Б. только в чистых помещениях
 - В. в производственных и складских зонах
 - Г. в подсобных помещениях
9. Непосредственный контакт операторов с открытой продукцией или деталями оборудования, контактирующими с продукцией
- А. не допускается
 - Б. допускается
 - В. допускается после обработки рук дезинфицирующим раствором
 - Г. допускается по мере острой необходимости
10. Внутренние поверхности помещений производственной зоны должны быть гладкими, не иметь открытых соединений и трещин, не выделять частиц и должны обеспечивать возможность эффективной уборки, а также, при необходимости, дезинфекции
- А. при производстве продукции для парентерального применения
 - Б. если исходные и первичные упаковочные материалы, промежуточные или нерасфасованные продукты подвергаются воздействию окружающей среды
 - В. если отсутствует эффективная воздухоподготовка
 - Г. при трехсменной работе
11. Трубопроводы для стоков (канализация) должны
- А. быть выполнены в виде открытых желобов
 - Б. быть максимально глубокими для удобства очистки и дезинфекции.
 - В. иметь необходимые размеры и быть оборудованы устройствами, предотвращающими обратный поток.
 - Г. изготовлены из негорючего материала
12. Внутрипроизводственный контроль
- А. проводится только после остановки технологического процесса
 - Б. проводится только в непроизводственной зоне
 - В. может проводиться в зоне производства, если это не создает помех для технологического процесса.
 - Г. может проводиться в зоне производства, после вывода из нее производственного персонала.
13. Поступающие материалы и сырье
- А. направляются на склад
 - Б. немедленно помещаются в карантин

- В. помещается в карантин при сомнении в их качестве
- Г. направляют в производственную зону для переработки

14. Одновременное или последовательное проведение операций с различными продуктами в одном и том же помещении

- А. не допускается
- Б. не допускается при отсутствии защиты от риска перепутывания или перекрестного загрязнения
- В. допускается
- Г. допускается при наличии дополнительного производственного персонала

15. При существенных изменениях технологии, в т.ч. любых изменениях оборудования или материалов, способных влиять на качество продукции или воспроизводимость процесса, следует

- А. получить разрешение Ростехнадзора
- Б. более детально документировать технологический процесс в соответствующем протоколе
- В. переоформить регламент производства
- Г. проводить аттестацию (испытания) соответствующих процессов.

Примеры вопросов:

1. Какие решётки Бравэ кубической сингонии вам известны? Почему каждая из них характеризуется собственным набором наблюдаемых рефлексов?

2. Как формируется дифрактограмма сложного вещества?

3. Как определить наличие или отсутствие того или иного соединения в исследуемом веществе? Каков алгоритм проведения РФА?

4. Перечислите, какие вклады в уширение дифракционного пика существуют.

5. На каких основных предположениях основано использование формулы Шеррера для определения размеров кристаллитов? Какие есть ограничения применения формулы Шеррера?

6. Какие параметры микроструктуры можно извлечь из построения Вильямсона - Холла? Всегда ли применим метод Вильямсона- Холла?

7. Таблеточная масса прилипает к пресс-инструменту. Укажите вероятные причины этого явления. Предложите вспомогательные вещества для исправления этого дефекта. При анализе гранулята фракция с размером частиц менее 0,1 составила 20%. Возможно ли использовать этот гранулят и каковы вероятные последствия такого использования. Если нет, каковы возможные варианты выхода из данной ситуации?

8. Таблетки, полученные методом прессования, имеют сколотые края. Укажите вероятные причины дефекта. Рассмотрите причины, связанные с составом, режимом прессования и оборудованием. Дайте заключение о качестве таблеток по прочности, если масса десяти таблеток до истирания была 2,355 г, после истирания - 2,145 г.

9. Таблетки распались в воде в течение 15 мин, о результате судили по присутствию мелких частиц таблеток на сетке качающейся корзинки. Удовлетворяют ли таблетки требованиям ГФ-ХIV? Продемонстрируйте порядок работы технологического оборудования для оценки времени распада мости таблеток.

10. Выберите и обоснуйте метод таблетирования, если порошок имеет плохую смачиваемость, кристаллы изодиаметрической формы, угол естественного откоса 250. Если необходимо, предложите вспомогательные вещества. Продемонстрируйте технику определения краевого угла смачивания.

11. Выберите и обоснуйте метод таблетирования, если порошок имеет плохую смачиваемость, кристаллы анизодиаметрической формы, угол естественного откоса 500.

Если необходимо, предложите вспомогательные вещества. Продемонстрируйте технику определения размеров частиц и фракционного состава порошка.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

«Отлично» – студент правильно ответил на 5 и более тестовых вопросов, при ответе на вопрос продемонстрировал глубокое знание всего материала, свободное владение понятийным аппаратом, научным языком и терминологией, знание основной литературы и знакомство с дополнительно рекомендованной литературой, логически правильное и убедительное изложение ответа.

«Хорошо» – студент правильно ответил на 5 и более тестовых вопросов, при ответе на вопрос продемонстрировал знание ключевых проблем и основного содержания материала, включенного в список вопросов для поступающих в аспирантуру, умение оперировать понятиями по своей тематике, в целом логически корректное, но не всегда точное и аргументированное изложение ответ.

«Удовлетворительно» – студент ответил на 5 и более тестовых вопросов, при ответе на вопрос продемонстрировал фрагментарные, поверхностные знания материала, затруднения с использованием понятийного аппарата и терминологии, недостаточное знание рекомендованной литературы, недостаточно логичное и аргументированное изложение ответа.

«Неудовлетворительно» – студент не ответил на достаточное количество тестовых вопросов (5 правильных ответов), демонстрирует незнание либо отрывочное представление о материале, включенном в список вопросов для сдачи зачета, неумение оперировать понятиями дисциплины; плохое знание рекомендованной литературы, неумение логически определенно и последовательно излагать ответ.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=35555>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Еремин Н.Н., Еремина Т.А. Неорганическая кристаллохимия. Книга I. Фундаментальные основные понятия. Москва: «КДУ», «Университетская книга», 2018. 394 с.

– Артамонова, О.В. Химия твердого тела: учеб. пособие / О.В. Артамонова; Воронежский ГАСУ. – Воронеж, 2015. – 168 с.

– Епифанов Г. И. Физика твердого тела. Санкт-Петербург: Лань, 2011. 288 с.

– Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. / пер. под общ. ред. А. А. Гусева // Москва: Альянс, 2013. 790 с.

– Волынский А., Бакеев Н. Роль поверхностных явлений в структурно-механическом поведении твердых полимеров. М.: Изд-во ФИЗМАТЛИТ, 2014. 536 с.

– Гусев А. И. Нестехиометрия, беспорядок, ближний и дальний порядок в твердом теле. Москва: Физматлит, 2007. 855 с.

– Словохотов Ю.Л. Основы кристаллохимии / Ю. Л. Словохотов. – М. : КДУ, 2021. – 608 с.

– Филатов С.К., Кривовичев С.В., Бубнова Р.С. Систематическая кристаллохимия. – СПб. : Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2019. – 231 с.

- Богдан Т.В. Основы рентгеновской дифрактометрии. М. : Изд-во МГУ, 2012. – 64 с.
- Цыбуля С.В., Черепанова С.В. Введение в структурный анализ нанокристаллов. – Новосибирск : НГУ, 2008 г. – 92 с.
- Доклинические исследования лекарственных веществ: учебное пособие / А. В. Буз-лама [и др.] ; под ред. А. А. Свистунова. – Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2017. – 384 с. – ISBN 978-5-9704-3935-7. – Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. – URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970439357.html>
- Биофармация, или основы фармацевтической разработки, производства и обоснования дизайна лекарственных форм : учебное пособие / И. И. Краснюк, Н. Б. Демина, М. Н. Анурова, Н. Л. Соловьева. – Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. – 192 с. ISBN 978-5-9704-5559-3. – Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. – URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455593.html>

б) дополнительная литература:

- Chapter 1: Practical Approaches for In Situ X-ray Crystallography: from High-throughput Screening to Serial Data Collection, in Protein Crystallography: Challenges and Practical Solutions, 2018, pp. 1-27.
- Progress of in situ synchrotron X-ray diffraction studies on the mechanical behavior of materials at small scales. Progress in Materials Science, 2018, 94, 384-434.
- New In-Situ and Operando Facilities for Catalysis Science at NSLS-II: The Deployment of Real-Time, Chemical, and Structure-Sensitive X-ray Probes. Synchrotron Radiation News, 2017, 30(2), 30–37.

в) ресурсы сети Интернет:

- Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система. <http://www.consultant.ru>
- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ <http://www.lib.tsu.ru/>
- С.А. Кузнецова УМК «Оксиды в химическом материаловедении» //Электронно-образовательный ресурс, Изд-во: Томск, 2009, на CD –диске. https://ido.tsu.ru/tsu_res/res30/
- Advanced Photon Source. – URL: <https://www.aps.anl.gov>.
- National Synchrotron Light Source II. – URL: <https://www.bnl.gov>. – URL: <https://wiki-nsls2.bnl.gov>
- European Synchrotron Radiation Facility – URL: <https://www.esrf.fr>.
- Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung (BESSY) – URL: <https://www.helmholtz-berlin.de>. – URL: https://www.mawi.tu-darmstadt.de/of/forschung_of/of_ausstattung/solias/index.en.jsp.
- Diamond Light Source – URL: <https://www.diamond.ac.uk>.
- Visualization for Electronic and Structural Analysis (VESTA) <https://jp-minerals.org/vesta/en/>
- ReX powder diffraction <http://www.rexpd.org/>
- Crystallography Open Database <http://www.crystallography.net/cod/>

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Кузнецова Светлана Анатольевна, канд. хим. наук, доцент, доцент кафедры неорганической химии ХФ ТГУ.

Людмила Николаевна Мишенина, канд. хим. наук, доцент, доцент кафедры неорганической химии ТГУ.

Лилия Александровна Селюнина, канд. хим. наук, доцент, доцент кафедры неорганической химии ТГУ.

Курзина Ирина Александровна, д-р физ.мат. наук, зав. кафедрой ПСФиМХ ХФ ТГУ