

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов»

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

«РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1 Цели и задачи дисциплины: Преподавание Рентгендифракционных методов в университетах ставит своей целью формирование научного мировоззрения, теоретической и практической подготовки современных специалистов, имеющих навыки определения кристаллической структуры и установления связи строения и свойств веществ с возможностью их практического применения. Задачами курса является получение студентами теоретических знаний и практических навыков по использованию рентгендифракционных методик для исследований неорганических материалов, а также для исследования особенностей их состава и структуры. Рассматриваются вопросы структурной кристаллографии и теории дифракции рентгеновского излучения. Сравняются возможности трех дифракционных методов: рентгеновского, нейтронографического и электронографического.

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО: Дисциплина «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 и является дисциплиной модуля 2 по выбору.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования НИР	Актуальные задачи современной химии Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования НИР	Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования НИР	Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Преддипломная практика

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: теоретические основы рентгendifракционных методик для диагностики простых и сложных соединений химических элементов, минералов, неорганических материалов, а также для исследования особенностей их состава и структуры, обладать наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии, наноструктурных технологиях и возможностью применения рентгendifракционных методов в данных направлениях.

Уметь: проводить обработку рентгendifракционных спектров, проводить рентгенофазовый анализ неорганических соединений, материалов, рассчитывать основные кристаллохимические характеристики неорганических материалов, анализировать структуру кристаллических соединений, обсуждать результаты структурных исследований, ориентироваться в современной литературе по рентгendifракционным исследованиям и структурной химии, вести научную дискуссию по данным вопросам, применять информационные базы данных.

Владеть: практическими навыками рентгendifракционных исследований неорганических соединений, современных неорганических материалов, владеть современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов рентгendifракционных исследований, сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **3** зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		3			
Аудиторные занятия (всего)	54	54			
В том числе:					
<i>Лекции</i>	36	36			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	18	18			
Самостоятельная работа (всего)	54	54			
Общая трудоемкость	час	108	108		
	зач. ед.	3	3		

5. Содержание дисциплины

5.1 Содержание разделов дисциплины

I. Природа рентгеновской дифракции

1. Природа рентгеновского излучения. Принципы работы рентгеновских аппаратов. Устройство рентгеновских трубок.
2. Рентгеновские спектры трубки, природа тормозного и характеристического спектра.
3. Дифракция рентгеновских лучей атомным рядом из атомов одного и двух сортов. Дифракция трехмерной атомной решеткой. Условия Лауэ.
4. Дифракция как отражение. Уравнение Брэгга.
5. Обратная решетка, взаимосвязь параметров прямой и обратной решетки. Сфера отражения. Векторная запись уравнения Брэгга.

II. Методы получения дифракционного эффекта

1. Метод порошка. Полихроматический метод. Метод вращения и качания.
2. Рентгенофазный анализ.
3. Схема и общие принципы работы 4-х кружных дифрактометров.
4. Новейшие методы получения и регистрации дифракционной картины.

III. Первый этап анализа структуры кристалла

1. Определение параметров ячейки по рентгенограммам. Число формульных единиц в элементарной ячейке.
2. Симметрия в кристаллическом пространстве. Сингонии, точечные группы симметрии, пространственные группы симметрии. Решетки Бравэ.
3. Симметрия кристаллов и симметрия лауэграмм. Закон Фриделя. Лауэвские классы симметрии.

IV. Второй этап анализа структуры кристалла

1. Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновской дифракции: поляризационный, температурный, кинематический, адсорбционный, экстинкционный, атомный. Понятие о первичной и вторичной экстинкции, термодиффузном рассеянии.
2. Фактор атомного рассеяния рентгеновских лучей.
3. Понятие структурной амплитуды. Закон сложения когерентных волн.
4. Преобразование Фурье и представление электронной плотности рядом Фурье. Формула электронной плотности для centrosymmetric кристалла.
5. Проблема начальных фаз в рентгеноструктурном анализе. Необходимость опорных данных (координаты тяжелых атомов, начальные фазы сильных отражений). Общая схема последовательного выявления всех атомов.
6. Функция Паттерсона (межатомная функция), ее запись, интерпретация. Определение атомных координат по межатомной функции.
7. «Прямые» методы решения структур кристаллов (основные понятия). Особенности расшифровки centrosymmetric и неcentrosymmetric структур.
8. Метод тяжелого атома в решении структур кристаллов, виды Фурье – синтезов.
9. Уточнение атомных координат методом наименьших квадратов. Параметры, характеризующие точность определения координат. R – фактор.
10. Влияние температуры на рентгенодифракционную картину. Температурный фактор атома, формы его записи, тепловой эллипсоид. Уточнение параметров тепловых колебаний.
11. Общая схема основных этапов рентгеноструктурного анализа.

V. Решение структурных задач дифракционными методами

1. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей и определение абсолютной конфигурации.
2. Сравнительные возможности рентгеноструктурного, нейтронографического и электронографического методов в определении структуры молекул.
3. Полнопрофильный анализ. Метод Ритвельда.
4. Прецизионный рентгеноструктурный анализ, понятие о разностной и деформационной электронной плотности. Химическая связь в кристаллах.

5.2 Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Лаб. зан.	СРС	Всего час.
1	Природа рентгеновской дифракции	6	1	4	11
2	Методы получения дифракционного эффекта	6	3	10	19
3	Первый этап анализа структуры кристалла	6	5	16	27
4	Второй этап анализа структуры кристалла	8	5	12	25
5	Решение структурных задач дифракционными методами	10	4	12	26
	Всего	36	18	54	108

6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)
1.	1	Знакомство с рентгеновским дифрактометром.	1

		Первичная обработка порошковых дифракционных данных.	
2.	2	Проведение рентгенофазового анализа образцов.	3
3	3-4	Определение сингонии, симметрии решеток Браве. Стереографическая проекция элементов симметрии.	2
4	3-4	Определение типа решеток Браве. Число формульных единиц в ячейке.	2
5	3-4	Уточнение кристаллических параметров ячейки	2
6	5	Расчет теоретической дифракционной картины и идентификация вещества по рентгендифракционным данным.	2
7	3-4	Определение типа решетки по рентгендифракционным данным поликристаллических материалов.	2
8	3-4	Индексирование дифракционных отражений с известными параметрами ячейки.	2
9	5	Основы пользования структурными банками данных.	2
	Всего		18

7. Практические занятия (семинары)

Не предусмотрены учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Лекционная аудитория с мультимедийным проектором.

2. Учебные аудитория, лаборатория рентгенографии и кристаллохимии №№ 9, 11 – с наборами решеток Браве и кристаллических решеток, Рентгеновский дифрактометр для поликристаллических исследований ДРОН-7 для проведения лабораторных работ.

9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение

Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions (EES)

Компьютеры для проведения вычислений, обработки результатов и доступа к информационным системам.

Пакет программ для обработки спектров и расчета характеристик по рентгендифракционным данным, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН. Пакет программ для рентгендифракционных исследований (НПП «Буревестник»).

Пакет программ для расчета кристаллохимических характеристик, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН.

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Сетевые библиотеки:

1. Большая Научная Библиотека (<http://sci-lib.com/>)

2. Каталог химических ресурсов на CHEMPORT.RU (http://www.chemport.ru/catalog_tree.php)

3. Список библиотек (доступ с ПК РУДН) (<http://www.rad.pfu.edu.ru/licenzirovannye-resursy/tehicheskie-i-estestvennye-nauki>)

4. Электронная библиотека РФФИ (<http://www.elibrary.ru>)

5. Совместный вычислительный проект № 14 для сбора лучших и наиболее часто используемых программ структурных исследований. Программное обеспечение, расположенное на сайте CCP14, доступно свободно для академических пользователей <http://www.ccp14.ac.uk>
6. International Union of Crystallography <http://www.iucr.org>

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

а) основная литература

1. Методы исследования материалов и процессов [Текст] : Учебное пособие для вузов / В.Ю. Конюхов, И.А. Гоголадзе, З.В. Мурга. - 2-е изд., испр. и доп. - М. : Юрайт, 2018. - 226 с. - (Университеты России). - ISBN 978-5-534-05475-0 : 459.00.

<https://biblio-online.ru/viewer/metody-issledovaniya-materialov-i-processov-439014#page/1>

2. Анисович, А.Г. Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения : научное издание / Национальная академия наук Беларуси. - Минск : Беларуская навука, 2017. - 209 с. : ил. - Библиогр.: с.199-205 - ISBN 978-985-08-2112-6 ; То же [Электронный ресурс].

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=483969

3. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ : учебное пособие / Г.В. Фетисов ; ред. Л.А. Асланов. - Москва : Физматлит, 2007. - 673 с. - ISBN 978-5-9221-0805-8

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=76647

б) дополнительная литература

1. Лабораторный практикум по курсу "Рентгендифракционные методы в неорганической химии" [Текст] : Для студентов-химиков 5 курса / Н.Н. Лобанов, В.П. Полякова. - М. : Изд-во РУДН, 2007. - 118 с. : ил. - ISBN 978-5-209-02725-6 : 80.00.

2. Основы структурного анализа химических соединений [Текст] : Учебное пособие для химических специальностей университетов / М.А. Порай-Кошиц. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1989. - 192 с. : ил. - ISBN 5-06-000074-5 : 0.40.

3. Современные методы структурного анализа веществ : учебник / М.Ф. Куприянов, А.Г. Рудская, Н.Б. Кофанова и др. "Южный федеральный университет". - Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2009. - 288 с. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9275-0653-8

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=241003

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

При изучении дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» предполагается посещение студентами лекций, выполнение расчётно-графических и лабораторных работ, написание тестов. В конце семестра проводится промежуточный контроль в виде письменного экзамена.

Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку к этим видам работ и контроля.

Подготовка к лабораторным работам

Прежде чем начать выполнение лабораторной работы, следует ознакомиться с соответствующим теоретическим разделом лекционного курса «Рентгендифракционные методы в

неорганической химии». Далее следует внимательно ознакомиться с описанием проведения лабораторной работы, основные этапы алгоритма обработки данных. Студент дополнительно должен изучить и знать правила техники безопасности работы с ИИИ, основные блоки прибора, инструкцию работы с программой, при использовании программного обеспечения.

Правила оформления работы в лабораторном журнале.

1. Название работы.
2. Цель работы.
3. Краткое теоретическое введение (основные законы и формулы, уравнения или графики, относящиеся к теме лабораторной работы).
4. Экспериментальная часть:
 - схема прибора или установки;
 - конкретное задание на лабораторную работу;
 - результаты измерений в виде таблиц и графиков;
 - расчёты по экспериментальным данным;
 - оценка погрешности измерений.
5. Выводы или заключение о результатах данной лабораторной работы.

Измерения и расчеты, проводимые по этим измерениям, в лабораторный журнал необходимо заносить с размерностью вычисленных величин.

В отчёте должна быть подробно представлена подготовительная и экспериментальная работа студента.

Отчёт должен содержать следующие сведения:

- реферативные литературные данные и данные информационных источников по теме задания;
- расчёты, необходимые для проведения работы;
- план выполнения работы;
- подробное описание хода выполнения работы, с результатами промежуточных анализов;
- графическое представление результатов выполнения работы с аргументированными выводами из проделанной работы.

При оценке выполнения лабораторной (расчётно-графической) работы учитывается качество выполнения экспериментальной работы, уровень компетентности студента в решении задач поставленных в задании и обоснованность и полнота сделанных выводов по результатам выполнения работы.

Подготовка к решению тестов и прохождению промежуточной аттестации (экзамена).

При подготовке к решению тестов, а также прохождению промежуточной аттестации, студенты могут пользоваться лекционным материалом, основной и дополнительной литературой, а также рекомендуемыми информационными источниками. Для самоконтроля в процессе подготовки студент может использовать как предложенные вопросы по темам лекций, так и стандартные тесты, представленные в рекомендуемых интерактивных курсах.

При оценивании тестовых заданий учитывается количество правильных ответов. Оценка экзаменационного ответа подразумевает полноту ознакомления студента с теоретическим материалом по заданному вопросу и аргументированность ответа студента.

Подготовка к контрольным работам и защите лабораторных работ

В контрольной работе проверяется ход решения, и итоговый ответ. Поэтому при подготовке к такой контрольной работе студент должен закрепить навыки решения задач, приобретенные как при разборе решенных задач, приведенных в лабораторном практикуме и при работе в аудитории.

Защита лабораторных работ включают в себя теоретические вопросы, поэтому при устной беседе преподаватель – студент преподаватель оценивает не только правильность ответов на заданные вопросы, но также умение студентов мыслить, давать обобщающие характеристики, делать выводы.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчики:

доцент кафедры неорганической химии



Н.Н. Лобанов

Руководитель программы

профессор,
кафедры органической химии



Варламов А. В.

Заведующий кафедрой

неорганической химии



В.Н. Хрусталев