

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук



СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.

Подпись

5 октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Рентгеновские методы

направление подготовки: 04.03.01 Химия

направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:
к.х.н. В.В. Каичев

Зав. каф. катализа и адсорбции
академик В.И. Бухтияров

Руководитель программы:
д.х.н., доц. В.А. Емельянов

Новосибирск, 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	3
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося	3
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	4
5. Перечень учебной литературы	5
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся..	5
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	5
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	5
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	5
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	6

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
Б-ПК-5. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и химического строения известных и новых соединений и материалов	Б-ПК-5.1. Выбирает и использует современные экспериментальные методы для подтверждения и установления состава и химического строения соединений и материалов	<u>имеет представление</u> о физических явлениях, лежащих в основе рассматриваемых в курсе рентгеновских методов, о принципах действия экспериментальной аппаратуры, о погрешности определяемых величин; <u>знает</u> области применения рассматриваемых в курсе рентгеновских методов в применении к изучению катализаторов; <u>умеет</u> планировать эксперимент по комплексному изучению катализаторов рентгеновскими методами.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины «Рентгеновские методы»:

- Физика
- Неорганическая химия
- Строение вещества
- Химия твердого тела
- Физическая химия
- Органическая химия

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо для освоения дисциплины «Кинетика гетерогенных каталитических реакций»:

- Производственная практика, научно-исследовательская работа

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 1з.е. (36 ч).

Форма промежуточной аттестации: 8 семестр – дифференцированный зачет.

№	Вид деятельности	Семестр
		8
1	Лекции, ч	14
2	Практические занятия, ч	12
3	Лабораторные занятия, ч	-
4	Занятия в контактной форме, ч	28
5	из них аудиторных занятий, ч	26
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	-
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	8
10	Всего, ч	36

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИК СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции и практические занятия.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

8 семестр
Лекции (14 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Раздел 1. Генерация рентгеновского излучения, синхротронное излучение.	2
Раздел 2. Рентгеновская дифракция, рентгенофазовый анализ.	2
Раздел 3. Рентгеновская дифракция, диффузное рассеяние рентгеновских лучей	2
Раздел 4. Электронная микроскопия и энергодисперсионный микроанализ.	2
Раздел 5. Малоугловое рентгеновское рассеяние.	2
Раздел 6. Рентгеновская фотоэлектронная и Оже-спектроскопия.	2
Раздел 7. Спектроскопия рентгеновского поглощения (EXAFS и XANES).	2

Практические занятия(12 ч)

Содержание практического занятия	Объем, час
Семинар 1. РФЭС и рентгеновская Оже-электронная спектроскопия	2
Семинар 2. Спектроскопия рентгеновского поглощения	2
Семинар 3. Рентгеновская дифракция	2
Семинар 4. Диффузное рассеяние рентгеновского излучения (PPA)	2
Семинар 5. Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения	2
Семинар 6. Электронная микроскопия и энергодисперсионный анализ	2

Самостоятельная работа студентов (8 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная работа во время занятий	4
из них:	
закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала	1
уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях	1
выполнение заданий текущего контроля (проверочных работ и	1

расчетных заданий)	
изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	1
Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации из них:	4
подготовка к зачету	4

5. Перечень учебной литературы

1. Фетисов, Г. В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. Москва, Издательство Физматлит, 2007. 672 с.
2. Мазалов, Л. Н. Рентгеновские спектры. Новосибирск, Издательство ИНХ СО РАН. 2003. 329 с.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

3. Рид, С. Электронно-зондовый микроанализ. Москва. Издательство Мир. 1979. 246 с.
4. Минаев, Х. М., Антошин, Г. В., Шапиро, Е. С. Фотоэлектронная спектроскопия и ее применение в катализе. Москва. Издательство Наука. 1981. 216 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

7.1. Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту.

7.2. Современные профессиональные базы данных:

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

8.1. Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

8.2. Информационные справочные системы

Не используются.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины «Рентгеновские методы» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень результатов обучения по дисциплине «Рентгеновские методы» и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

10.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Рентгеновские методы»

Текущий контроль успеваемости:

Текущий контроль успеваемости студентов включает выполнение ряда письменных заданий – проверочных работ. Проверочные работы выполняются студентами самостоятельно дома, включают обработку экспериментальных данных с помощью современного программного обеспечения и высылаются преподавателю на электронную почту к следующему занятию. В начале каждой лекции также проводится опрос студентов по материалу, изложенному на предыдущей лекции.

Промежуточная аттестация:

Допуск к дифференцированному зачету осуществляется после выполнения всех проверочных работ.

Оценивание полученных знаний и выставление оценки (диф.зачета) происходит по пятибалльной системе на основании устного выступления студента. Зачет происходит в виде «конференции», во время которой все студенты по очереди представляют презентацию по одному из теоретических вопросов к зачету и решение одной из практических задач, а также отвечают на дополнительные вопросы по теме спецкурса.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Рентгеновские методы»

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
Б-ПК-5.	Б-ПК-5.1. Выбирает и использует современные экспериментальные методы для подтверждения и установления состава и химического строения соединений и материалов	– <u>имеет представление</u> о физических явлениях, лежащих в основе рассматриваемых в курсе рентгеновских методов, о принципах действия экспериментальной аппаратуры, о	Дифференцированный зачет, расчетное задание, проверочная работа

		погрешности определяемых величин; – <u>знает</u> области применения рассматриваемых в курсе рентгеновских методов в применении к изучению катализаторов; – <u>умеет</u> планировать эксперимент по комплексному изучению катализаторов рентгеновскими методами.	
--	--	---	--

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Демонстрирует знания основных определений , используемых в курсе "Рентгеновские методы", – знает принципы действия экспериментальной аппаратуры, – умеет планировать эксперимент по комплексному изучению катализаторов рентгеновскими методами. 	<i>Отлично</i>
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Демонстрирует знания основных определений , используемых в курсе "Рентгеновские методы", – знает принципы действия экспериментальной аппаратуры, – умеет без грубых ошибок планировать эксперимент по комплексному изучению катализаторов рентгеновскими методами, – отвечает на дополнительные вопросы 	<i>Хорошо</i>
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Демонстрирует частичные знания основных определений , используемых в курсе "Рентгеновские методы", – знает принципы действия экспериментальной аппаратуры, – умеет с существенными ошибками планировать эксперимент по комплексному изучению катализаторов рентгеновскими методами. – частичные ответы на дополнительные вопросы 	<i>Удовлетворительно</i>
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Имеет представление об основных определениях в курсе "Рентгеновские методы", – демонстрирует неполное знание или допускает грубые ошибки при изложении материала по основным разделам курса, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы 	<i>Неудовлетворительно</i>

Примерные теоретические вопросы к зачету:

1. Конструкция рентгеновских трубок, характеристическое и тормозное излучение. Система обозначения рентгеновских переходов. Принцип действия и конструкция синхротронов 1, 2, 3 и 4 поколений. Тенденции развития международных центров СИ. Рентгеновские лазеры и принцип рекуперации энергии.
2. Основы метода РФЭС. Система обозначения линий. Форма линий. Спин-орбитальное расщепление. Калибровка спектрометра. Положение линий относительно уровня Ферми спектрометра. Методы учета эффекта зарядки образцов. Применение метода РФЭС для анализа поверхности твердых тел. Количественный анализ. Глубина анализа. Послойный анализ. Химсдвиг. Эффект релаксации. Система обозначений и анализ Оже-спектров. Понятие Оже-параметра.
3. Понятие края рентгеновского поглощения. Тонкая структура спектров рентгеновского поглощения. Метод XANES. Получение, обработка и интерпретация спектров. Правила отбора. Метод EXAFS - получение и обработка спектров. Фактор Дебая-Валлера. Точность определения координационных чисел и межатомных расстояний.
4. Рентгеновская дифракция. Уравнение Вульфа-Бреггов. Формирование дифракционной картины в методе порошка. Дифрактометры с фокусировкой по Брэггу-Брентано. Зеркало Гебеля. Определение параметров решетки по дифракционным данным. Твердые растворы. Правило Вегарда. Влияние различного рода несовершенств кристаллической структуры и образца на дифракционную картину. Методы определения размеров областей когерентного рассеяния, величины микродеформаций. Формула Шеррера. Метод Вильямсона-Холла. Метод радиального распределения для исследования локальной структуры. Основные уравнения и принципы.
5. Сканирующая электронная микроскопия. Методы просвечивающей микроскопии. Темнопольное и светлопольное изображение. Фазовый контраст. Разрешающая способность. Энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия. Режим картирования.

Примерные типы практических задач, решаемых на зачете:

1. Вы планируете провести экзотическое РФЭС исследование NaCl с использованием кислородного K α излучения. Какими будут кинетические энергии электронов 1s, 2s, 2p и 3s (для натрия и хлора)?
2. Невнимательный студент взял полученные РФЭС спектры, но забыл уточнить, какому элементу(ам) соответствуют пики. Пожалуйста, посмотрите энергии пиков, их относительные площади и с помощью таблицы, определить элемент(ы) и уровни энергии, которым соответствуют эти два пика.

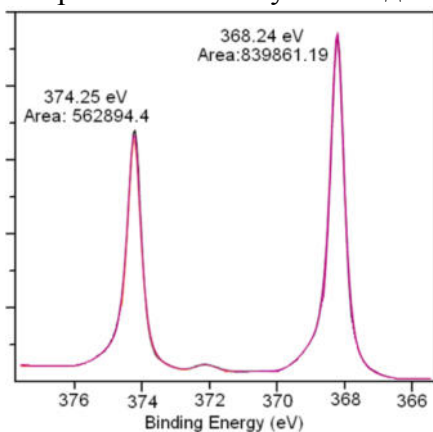


Рисунок к задаче 2.

3. Чем отличается запись XANESпектров в режиме «Totalelectronyield» и в режиме регистрации «выхода флуоресценции»?
4. Как известно, EXAFS, в частности, дает информацию о расстояниях между атомами. Вы синтезировали кобальтовый комплекс, в котором атом кобальта окружен атомами азота и кислорода. Перед вами стоит задача определить расстояния металл-кислород и металл-азот. Опишите, как вы это будете делать, и какие проблемы могут у вас возникнуть.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы дисциплины
«Рентгеновские методы»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Ученого совета ФЕН	Подпись ответственного