

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Донецкий государственный университет»

Химический факультет
Кафедра неорганической химии



УТВЕРЖДАЮ
проректор

Машаров
«29» марта 2024 г.
МП

П.А. Машаров

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ

Укрупненная группа направлений
подготовки

04.00.00 Химия

Программа высшего образования

Программа специалитета

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная
химия

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

Очная

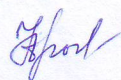
Рабочая программа адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2024

Рабочая программа дисциплины «Рентгенофазовый анализ» для обучающихся по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:

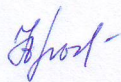
доцент кафедры неорганической химии,
канд. хим. наук, доцент



Н.В. Яблочкова

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры неорганической химии.
Протокол от 26.03.2024 г. № 14

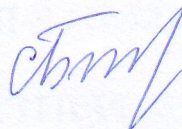
Заведующий кафедрой



Н.В. Яблочкова

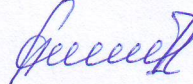
СОГЛАСОВАНО:

Декан химического факультета
28.03.2024 г.



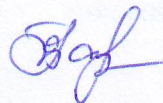
С.Г. Бахтин

Учебно-методическая комиссия химического факультета
Протокол от 27.03.2024 г. № 2.
Председатель



Р.И. Лыга

Руководитель основной профессиональной
образовательной программы,
канд. хим. наук, доц.
28.03.2024 г.



О.В. Баранова

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы специалитета: Неорганическая химия, Физическая химия, Кристаллохимия, Основы неорганического синтеза.

Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

Производственная практика: преддипломная.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (программа специалитета)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ДВ.5. Рентгенофазовый анализ
Часть образовательной программы	Вариативная часть: выбор студента
Количество зачетных единиц/ всего часов	5 / 180

2.2. Распределение часов по формам и периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы+ контроль	всего	
Очная	5	9	39	26	-	115	180	Экзамен

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Приобретение студентами навыков определения фазового состава кристаллов и порошков с помощью рентгенофазового анализа, как основного метода исследования структуры твердых веществ.

Овладение студентами знаний и умений по физике рентгеновского излучения, рентгеновской аппаратуре, методам фазового анализа, по геометрии и симметрии внешних форм кристаллов, кристаллической решетки, кристаллической структуры, знакомство с принципом работы и устройством рентгеновского дифрактометра; получение навыков пробоподготовки; теоретических знаний о съемке дифрактограмм, анализ и расшифровка рентгенограмм образцов неизвестного состава методом сравнения с рентгенограммами эталонов, индентирование рентгенограмм кристаллов различных сингоний.

4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

4.1. Компетенции

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

4.2. Индикаторы компетенций

ПК-1.1. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов

4.3. Результаты обучения

ПК-1.1.1. Знает связь кристаллической структуры с составом, химической связью и свойствами простых веществ и соединений, устройство и принцип работы рентгеновских трубок и рентгеновского дифрактометра в целом, правила техники безопасности при работе на рентгеновских установках, методы приготовления образцов для дифрактометрических исследований, методы проведения качественного фазового анализа.

ПК-1.1.2. Умеет выбирать анод и фильтр; промерять и рассчитывать рентгенограмму; проводить фазовый анализ с помощью электронной базы данных.

ПК-1.1.3. Владеет физико-химическими методами анализа соединений; способами индирования рентгенограмм; возможностями поиска необходимой информации в научной и справочной литературе; приемами оформления результатов эксперимента и расшифровки их.

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Природа рентгеновского излучения	1.1. Введение. Открытие Рентгеном нового вида лучей (1895). Установление их природы Лауэ. 1.2. Открытие Дебаем и Шеррером метода порошка. 1.3. Преимущества и недостатки методов монокристалла и порошка.
Раздел 2. Спектры испускания	2.1. Спектры сплошной и характеристический. 2.2. Напряжение возбуждения. 2.3. Компоненты рентгеновских полос, их взаимное расположение и интенсивности. 2.4. Интенсивность сплошного и характеристического излучения. 2.5. Выбор напряжения на аноде трубки. 2.6. Закон Мозли.
Раздел 3. Спектры поглощения	3.1. Виды взаимодействия рентгеновских лучей с веществом: образование электрон - позитронных пар, фотоэлектрический эффект, рассеивание рентгеновских лучей. 3.2. Поглощение рентгеновских лучей веществом. 3.3. Коэффициент поглощения: линейный, массовый, атомный. Их зависимость от положения элемента в периодической системе. 3.4. Аналитическое и графическое описание спектра поглощения. 3.5. Край полосы поглощения. 3.6. Факторы, которые влияют на коэффициент поглощения.
Раздел 4. Спектры в	4.1. Выбор материала анода и фильтра для

рентгенофазовом анализе	рентгеновского излучения по спектрам поглощения и испускания. 4.2. Уравнение Вульфа-Бреггов. 4.3. Использование уравнения и его значение для рентгеновского анализа.
Раздел 5. Способы регистрации рентгеновского излучения	5.1. Способы регистрации рентгеновского излучения. 5.2. Принцип фотографического и ионизационного способа регистрации. 5.3. Пропорционные и сцинтилляционные счетчики.
Раздел 6. Рентгеновские установки	6.1. Рентгеновские трубки. 6.2. Рентгеновские камеры. 6.3. Дифрактометры. 6.4. Монохроматизация излучения.
Раздел 7. Фазовый анализ	7.1. Промер и расчет рентгенограмм в зависимости от способа регистрации. 7.2. Расчет величин межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей. 7.3. Методика фазового анализа. 7.4. Картотека ASTM, ICPDS.
Раздел 8. Индицирование рентгенограмм	8.1. Уравнение для индицирования. 8.2. Вывод уравнения взаимосвязи между параметрами ячейки, межплоскостными расстояниями и индексами плоских сеток для разных сингоний. 8.3. Индицирование рентгенограмм кубической сингонии. 8.4. Индицирование рентгенограмм тетрагональной сингонии. 8.5. Индицирование рентгенограмм гексагональной сингонии. 8.6. Методы индицирования ромбической и моноклинной сингонии. 8.7. Индицирование рентгенограмм методом подбора изоструктурного соединения и методом гомологии. 8.8. Критерии надежности индицирования

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 5, семестр – 9

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Природа рентгеновского излучения	3	2	-	10	15
Раздел 2. Спектры испускания	4	2	-	15	21
Раздел 3. Спектры поглощения	4	2	-	15	21
Раздел 4. Спектры в рентгенофазовом анализе	4	3	-	10	17
Раздел 5. Способы регистрации рентгеновского излучения	5	4	-	15	24
Раздел 6. Рентгеновские установки	5	4	-	15	24

Раздел 7. Фазовый анализ	8	6	-	15	29
Раздел 8. Индицирование рентгенограмм	6	3	-	20	29
ИТОГО ЗА 9 СЕМЕСТР	39	26	-	38	180

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

1. Устройство и принцип работы рентгеновских трубок.
2. Непрерывный рентгеновский спектр излучения, связь интенсивности рентгеновского излучения с параметрами рентгеновской трубки.
3. Линейчатый спектр рентгеновского излучения, необходимые условия для возникновения характеристических линий.
4. Принципы обозначений характеристических линий рентгеновского излучения.
5. Спектр поглощения рентгеновского излучения, края поглощения.
6. Основные способы монохроматизации рентгеновского излучения.
7. Способы регистрации рентгеновского излучения. Детекторы рентгеновского излучения.
8. Блок-схема дифрактометра, назначение основных блоков дифрактометра.
9. Необходимость фокусировки рассеянного рентгеновского излучения, метод фокусировки рассеянного излучения на дифрактометрах.
10. Правила техники безопасности при работе на рентгеновских установках.
11. Пространственная решетка, кристаллографические сингонии, элементарная ячейка и ее виды.
12. Кристаллографические индексы плоскостей, межплоскостное расстояние.
13. Условие дифракции рентгеновских лучей.
14. Методы приготовления образцов для дифрактометрических исследований.
15. Способы определения угла дифракции.
16. Способы определения интенсивности дифракционных максимумов.
17. Разделение рефлексов, полученных от K_{α} - и K_{β} -излучения.
18. Связь между параметрами ячейки и межплоскостным расстоянием в зависимости от сингонии – квадратичные формы.
19. Методика индицирования дифрактограмм поликристаллов кубической сингонии.
20. Правила определения типа решетки Браве кристаллов кубической сингонии.
21. Понятие фазы вещества. Задачи, решаемые методом фазового анализа.
22. Рентгеновская характеристика вещества, реперные линии.
23. Метод качественного фазового анализа.
24. Чувствительность качественного фазового анализа.
25. Факторы, влияющие на чувствительность фазового анализа.
26. Методы проведения качественного фазового анализа.
27. Учет поглощения в плоском образце при количественном фазовом анализе.
28. Методы количественного определения содержания фаз в образцах.
29. Требования к процедуре проведения количественного фазового анализа.
30. Подготовка пробы для количественного фазового анализа.
31. Погрешность количественного фазового анализа.

7.2. Темы письменных работ (типы задач)

Контрольные работы по проверке теоретических знаний – по всем темам, с использованием контрольных вопросов, подобных указанным выше.

Лабораторные работы по индифференцированию рентгенограмм различных сингоний, расшифровке дифрактограмм, фазовому анализу, определению параметров элементарной ячейки, самостоятельные работы по решению задач.

7.3.Образец содержания экзаменационного билета

В случае ведения учебного процесса с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, содержание билета может отличаться от приведенного.

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Способы регистрации рентгеновского излучения. Детекторы рентгеновского излучения.
2. Элементарная ячейка, виды ячеек.
3. Правила определения типа решетки Браве кристаллов кубической сингонии.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, практическое применение знаний на реальных данных), выполнение лабораторных работ.

8.1. Семестр 9

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-8	Организационно-учебная работа в аудитории	5
	Индивидуальная работа по решению задач	10
	Контрольные работы	10
	Защита лабораторных работ	25
ИТОГО		50
Экзамен		50
Итоговая оценка		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D	удовлетворительно	зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
 - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа;
 - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
 - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - письменные задания выполняются на компьютере;
 - экзамен и зачёт проводятся в устной форме или выполняются в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - в печатной форме увеличенным шрифтом;
 - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории на группу, оборудованной меловой или интерактивной доской, мультимедийным проектором и экраном – химический факультет ДонГУ (г. Донецк, ул. Щорса 17а).

Лабораторные занятия по данному курсу проводятся в химических лабораториях кафедры неорганической химии, оснащенных необходимым оборудованием и реактивами.

Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

11.1. Основная литература

1. Рентгенофазовый анализ: учебное пособие для студентов химического факультета / А.В. Игнатов, К.А. Чебышев, Н.В. Яблочкова. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2020. – 136 с.
2. Ковба Л. М. Рентгенофазовый анализ/ Л. М. Ковба, В. К. Трунов. –2-е изд., доп. и перераб.– М.: МГУ, 1976. – 232 с.
3. Мони́на Л. Н. Рентгенография. Качественный рентгенофазовый анализ: учеб. пособие / Л. Н. Мони́на; Тюменский гос. ун-т, Ин-т химии. – Тюмень: Изд-во Тюменского ун-та, 2016. – 120 с.

11.2. Дополнительная литература

1. Миркин Л. И. Рентгеноструктурный анализ. Индексирование рентгенограмм. Справочное руководство / Л. И. Миркин. – М.: Наука, 1981. – 496 с.
2. Храмов А. С. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов: в 5 ч. Ч. I. Элементы теории, руководство и задания к лабораторным работам: учеб.-метод. пособие для студентов физического факультета / А. С. Храмов, Р. А. Назипов. – Изд. 2-е, испр. и доп. – Казань: КГУ, 2009. –64 с.
3. Горюнов А.В. Рентгенофазовый анализ порошковых материалов на дифрактометре ДР-02 РАДИАН Учебное пособие / А.В. Горюнов, В.И. Зарембо, Г.Э. Франк-Каменецкая, С.О. Шульгин. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 48 с.
4. Скрипникова Н.К. (сост.) Рентгенофазовый анализ. Методические указания к практическим занятиям. — Томск: Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та (ТГАСУ), 2010. — 39 с.
5. Дубинин П.С., Якимов И.С., Пиксина О.Е. (сост.) Компьютерный качественный и количественный рентгенофазовый анализ. Учебно-методическое пособие. — Красноярск: Сиб. федер. ун-т (СФУ), 2015. — 86 с.

12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ;Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.
2. **eLIBRARY.RU:** научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru/>(дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. –Текст: электронный.
3. Научная электронная библиотека **«КиберЛенинка»:** сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/>. – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
4. Электронно-библиотечная система **«Лань»:** [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com>(дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей.– Текст: электронный.
5. **ЭБС Юрайт:** электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://biblio-online.ru>(дата обращения: 01.09.2023).– Режим доступа: дляавторизов. пользователей. – Текст: электронный.

6. **Электронно-библиотечная система ДонГУ:** сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

7. **Электронный каталог** Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.

8. **Электронный архив ДонГУ:** раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный.

13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. MicrosoftOffice (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. MicrosoftVisualStudio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, AdobeAcrobatReader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).