

**Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
Протокол № 4 от 26 мая 2017 г.**

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор

 /В.В. Лунин/

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины: **Рентгеновская дифракция и электронная микроскопия для исследования неорганических соединений.**

Основная цель дисциплины: Данный курс направлен на достаточно углубленное изучение основных современных методов анализа структуры и состава твердофазных неорганических соединений и материалов. Курс состоит из двух частей: первая часть посвящена методам порошковой рентгеновской дифракции, вторая - электронной микроскопии.

2. Уровень высшего образования – магистратура

3. Направление подготовки - 04.04.01 «Химия»

4. Место дисциплины в структуре ООП: вариативная часть ООП, профессиональный цикл.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
(МПК-5) Способность обоснованно выбирать и применять современные методы исследования состава, структуры	Код 31 (МПК-5) ЗНАТЬ: теоретические основы современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов
	Код 32 (МПК-5) ЗНАТЬ: возможности и ограничения применения физических методов исследования

и свойств неорганических веществ и материалов	Код У1 (МПК-5) УМЕТЬ: выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов
	Код У2 (МПК-5) УМЕТЬ: использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов.
	Код В1 (МПК-5) ВЛАДЕТЬ: информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, иметь представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов
	Код В2 (МПК-5) ВЛАДЕТЬ: навыками работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических веществ и материалов

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часа, из которых 80 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (20 часов - лекции, 56 часов – семинары, и 4 часа на проведение промежуточной аттестации), 28 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения модуля, предварительные условия.

Для полноценного усвоения данного образовательного модуля **необходимо:**

- **знать** основные естественнонаучные дисциплины в рамках образовательной программы бакалавра; изучение дисциплин данного модуля опирается, главным образом, на теоретических знаниях в области неорганической химии, кристаллохимии и физической химии, физики, математического анализа;
- **уметь** пользоваться химической литературой и современными интернет-ресурсами;
- **владеть** базовыми навыками работы с компьютерными программами.

8. Аннотация содержания дисциплины (модуля)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной	Всего (з.е. / часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы	Самостоятельная работа обучающегося, часы

аттестации по дисциплине (модулю)		из них						из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа, в т.ч., лабораторные и практические работы	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия* и	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка к контрольным работам	Всего
Раздел 1. Теоретические основы рентгеновской дифракции.		4	11			2	17	3	2	5
Раздел 2. Методы порошковой рентгеновской дифракции.		4	11			2	17	3	2	5
Раздел 3. Рентгеноструктурный анализ.		4	8			2	14	3	2	5
Раздел 4. Растровая электронная микроскопия.		2	5			1	8	2	2	4
Раздел 5. Рентгеноспектральный микроанализ.		2	3			1	6	2	2	4
Раздел 6. Просвечивающая электронная микроскопия.		4	8			2	14	3	2	5
Промежуточная аттестация	4						4			

Итого	108	20	46			10*	80	16	12	28
--------------	------------	----	----	--	--	-----	-----------	----	----	-----------

* Текущий контроль проводится в рамках семинарских занятий

Содержание разделов дисциплины

Тематические разделы, рассматриваемые на лекциях и семинарах.

Раздел 1. Теоретические основы рентгеновской дифракции.

1. Основы кристаллохимии. Симметрия кристаллов.
2. Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом.
3. Основы кинематической теории дифракции.
4. Дифракция на реальных системах. Теоретическая дифрактограмма.
5. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограмм. Размер ОКР и концентрация микронапряжений тур по данным порошковой дифракции.
6. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограмм. Текстурирование.
4. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Раздел 2. Методы порошковой рентгеновской дифракции.

1. Техника дифракционного эксперимента.
2. Общий вид дифрактограммы. Профильный анализ.
3. Рентгенофазовый анализ. Базы данных ICDD.
4. Применение порошковой дифракции. Количественный фазовый анализ.
5. Исследование тонких пленок, рефлектометрия.
6. Другие дифракционные методы. Электронная микроскопия, дифракция нейтронов, малоугловое рассеяние.
4. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Раздел 3. Рентгеноструктурный анализ.

1. Индексирование дифрактограмм.
2. Метод гомологии в задачах индексирования дифрактограмм.
3. Симметрия обратного пространства. Взаимосвязь дифрактограммы и кристаллической структуры соединения.
4. Методы решения структур по порошковым дифракционным данным.
5. Уточнение кристаллических структур. Метод Ритвельда.
5. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Раздел 4. Растровая электронная микроскопия.

1. Физические основы метода растровой электронной микроскопии (РЭМ).
2. Практические аспекты растровой электронной микроскопии.

3. Применение метода растровой электронной микроскопии.
4. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Раздел 5. Рентгеноспектральный микроанализ.

1. Физические основы метода рентгеноспектрального микроанализа (РСМА).
2. Практика рентгеноспектрального микроанализа.
3. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Раздел 6. Просвечивающая электронная микроскопия.

1. Основы просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Электронная дифракция.
2. Исследование материалов методами просвечивающей электронной микроскопии.
3. Методы подготовки образцов для ПЭМ.
4. Аналитическая просвечивающая электронная микроскопия.
6. Контрольная работа в рамках семинарского занятия.

Самостоятельное изучение разделов дисциплин

Самостоятельная работа студентов состоит в проработке лекционного материала, подготовке к семинарским занятиям и контрольным работам, выполнению домашних заданий, а также подготовке к экзамену.

Примерный перечень видов работ, проводимых самостоятельно:

- Работа с лекционным материалом и рекомендованной литературе по теме: **Теоретические основы рентгеновской дифракции. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**
- Работа с лекционным материалом и рекомендуемой литературе по теме: **Методы порошковой рентгеновской дифракции. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**
- Работа с лекционным материалом и рекомендуемой литературе по теме: **Рентгеноструктурный анализ. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**
- Работа с лекционным материалом и рекомендуемой литературе по теме: **Растровая электронная микроскопия. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**
- Работа с лекционным материалом и рекомендуемой литературе по теме: **Рентгеноспектральный микроанализ. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**
- Работа с лекционным материалом и рекомендуемой литературе по теме: **Просвечивающая электронная микроскопия. Подготовка к контрольной работе по данной теме.**

- Подготовка к экзамену.

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, практическая демонстрация основных режимов работы на электронном микроскопе;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература

1. V.K. Pecharsky, P.Y. Zavalij, Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. Springer, 2009.
2. А. Вест. Химия твёрдого тела, т.1. М.: Мир, 1988
3. Л.М. Ковба, В.К. Трунов. Рентгенофазовый анализ. М.: МГУ, 1976.
4. Д. Брандон, У. Каплан. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля. М.: Техносфера, 2004.
5. Дж. Гоулдстейн, Д. Ньюбери, П. Эчлин, Д. Джой, Ч. Фиори, Ф. Лифшин. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. В 2 книгах. Пер. с англ. — М.: Мир, 1984.
6. V.D. Scott, G. Love. Quantitative electron-probe microanalysis. - Ellis Horwood Ltd., 1983.
7. D.B. Williams, C.B. Carter. Transmission Electron Microscopy. A Textbook for Materials Science. In 4 Books – Plenum Press: New York & London, 1996.

Дополнительная литература

1. R.A. Young (Ed.). The Rietveld method. Oxford University Press, 1993.
2. G.E. Bacon. Neutron diffraction. Clarendon Press, 1975
3. W.I.F. David, K. Shankland, L.B. McCusker, Ch. Baerlocher (Eds.). Structure Determination from Powder Diffraction Data. Oxford University Press, 2006.
4. Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М. Электронная микроскопия тонких кристаллов. - М.: Мир, 1968, 575 с.
5. Д. Синдо, Т. Оикава, Аналитическая просвечивающая электронная микроскопия. Пер. с англ. - М.: Техносфера, 2006, 256 с.
6. З. А.В. Гаршев, В.И. Путляев Исследование материалов методами растровой электронной микроскопии. Методическая разработка к курсу дистанционного образования, Москва, 2008.

Периодическая литература

Журналы «Успехи химии», «Журнал неорганической химии», «Кристаллография», «Журнал структурной химии», Acta Crystallographica, Materials Chemistry, Journal Journal of Materials Chemistry, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Chemistry - A European Journal, Journal of Crystal Growth

Интернет-ресурсы

1. Доступ к основным мировым on-line библиотекам и базам данных ссылок и рефератов по темам неорганической химии (Web of Science и другие)
2. Доступ к on-line ресурсам и журналам издательства Elsevier, Springer и других.
3. www.iucr.org – Международный союз кристаллографии
4. база данных ICDD PDF-2 The CCP14 (Collaborative Computational Project No. 14) in Powder and Small Molecule Single Crystal Diffraction www.ccp14.ac.uk
5. www.pxrd.ru
6. www.ccp14.ac.uk
7. A Guide to Scanning Microscope Observation
http://www.jeolusa.com/DesktopModules/Bring2mind/DMX/Download.aspx?Command=Core_Download&EntryId=1&PortalId=2&TabId=320

Программное обеспечение

1. STOE WinXPow
2. Jana 2006
3. программный комплекс INCA Energy для проведения РСМА
2. java-версия пакета для ПЭМ JEMS (P. Stadelmann, CIME, EPFL, Switzerland;
http://cimewww.epfl.ch/people/stadelmann/jemsSE/jemsSEv3_8326u2012.htm), или версия для PC
11. Язык преподавания – русский
12. Преподаватели: н.с., к.х.н. Чижов П.С., доцент, к.х.н. Путляев В.И., доцент, к.х.н. Гаршев А.В.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций в Приложении.

2. Материалы к текущей (контрольные работы), промежуточной аттестации (вопросы к зачету).

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль успеваемости проводится еженедельно. Критерии формирования оценки – посещаемость занятий, активность работы студентов на лекциях и семинарах, уровень подготовки к занятиям, результаты контрольных работ.

1. Образец контрольной работы №1 по теме: Теоретические основы рентгеновской дифракции.

Задание. Понятие о кристаллической решетке. Симметрия кристаллической решетки, основная теорема кристаллографии.

2. Образец контрольной работы №2 по теме: Методы порошковой рентгеновской дифракции.

Задание. Когерентное упругое рассеяние – дифракция рентгеновского излучения, вывод формулы для определения комплексной амплитуды рассеянного рентгеновского излучения (РИ).

3. Образец контрольной работы №3 по теме: Рентгеноструктурный анализ.

Задание. Основные приближения кинематической теории дифракции. Рассеяние на атоме, на цепочке электронов, цепочке атомов. Интерференционная функция Лауэ.

4. Образец контрольной работы №4 по теме: Растровая электронная микроскопия.

Задание. Распространение РИ в поликристаллическом образце. Средний коэффициент поглощения. Взаимосвязь между объемной долей фазы и интенсивностью рефлекса.

5. Образец контрольной работы №5 по теме: Рентгеноспектральный микроанализ.

Задание. Особенности рассеяния нейтронов.

6. Образец контрольной работы №4 по теме: Просвечивающая электронная микроскопия.

Задание. Понятие о субструктуре и сверхструктуре.

Промежуточный контроль успеваемости (вопросы к зачету)

Для аттестации по итогам освоения дисциплины «Рентгеновская дифракция и электронная микроскопия для исследования неорганических соединений» предусмотрен зачет. Для курса разработана балльно-рейтинговая система, зачет проставляется с учетом успеваемости обучающегося при работе в семестре. Зачет проводится устно и включает в себя ответы на вопросы из перечня:

1. Рентгеновское излучение (РИ) как электромагнитное излучение. Типы источников РИ. Взаимодействие РИ с веществом. Томсоновское рассеяние, комптоновское рассеяние, фотоэффект.

2. Порошковая дифрактограмма как 1D проекция 3D дифракционной картины, рассмотрение дифракции на поликристаллической пробе с помощью построения Эвальда. Лоренц-фактор, геометрический фактор. Понятие о текстуре образца, текстурный фактор. Коэффициент экстинкции. Фактор повторяемости рефлексов
3. Природа и характеристики рентгеновского излучения в электронном микроскопе. Энергодисперсионная спектроскопия (EDX) и спектроскопия с волновой дисперсией (WDX).
4. Электронная дифракция: дифракция с селекторной диафрагмой SAED (локальность, точность), микролучевая (MBD) и нанолучевая (NBD) дифракция, дифракция в сходящемся пучке – CBED (возможности), неупругое рассеяние электронов и формирование линий Кикучи.
5. Понятие о передаточной функции микроскопа. Типы aberrации и возможности их коррекции. Периодичность контраста как функция дефокуса. Оптимальный дефокус (фокус Шерцера и фокус Гаусса).

КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ ВЫПУСКНИКА ПРОГРАММЫ МАГИСТРАТУРЫ МГУ

Код и название КОМПЕТЕНЦИИ:

(МПК-5) Способность обоснованно выбирать и применять современные методы исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

Специализированная компетенция выпускника программы магистратуры по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы магистратуры, должен:

- **ЗНАТЬ:** основные естественнонаучные дисциплины в рамках образовательной программы бакалавра; изучение дисциплин данного модуля опирается, главным образом, на теоретических знаниях в области неорганической химии, кристаллохимии и физической химии, физики, математического анализа.
- **УМЕТЬ:** пользоваться химической литературой и современными интернет-ресурсами.
- **ВЛАДЕТЬ:** базовыми навыками работы с компьютерными программами.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (МПК-5) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

Планируемые результаты обучения	Критерии и показатели оценивания результатов обучения					Оценочные средства
	1	2	3	4	5	
	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	
ЗНАТЬ: теоретические основы современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов Код 31 (МПК-5)	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о теоретических основах современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов	В целом успешные, но не систематические представления о теоретических основах современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о теоретических основах современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов	Сформированные представления о теоретических основах современных методов исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов	Контрольные работы. Устное собеседование на зачете.
ЗНАТЬ: возможности и ограничения применения физических методов исследования Код 32 (МПК-5)	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о возможностях и ограничениях применения физических методов	В целом успешные, но не систематические представления о возможностях и ограничениях применения	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о возможностях и ограничениях применения	Сформированные представления о возможностях и ограничениях применения физических методов	Контрольные работы. Устное собеседование на зачете.

		исследования	физических методов исследования	физических методов исследования	исследования	
УМЕТЬ: выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов Код У1 (МПК-5)	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов	В целом успешное, но не систематическое умение выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использования умения выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов	Сформированное умение выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов	Контрольные работы. Устное собеседование на зачете.
УМЕТЬ: использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов Код У2 (МПК-5).	Отсутствие умений	Фрагментарное умение использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов	В целом успешное, но не систематическое умение использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использования умения использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов	Сформированное умение использовать современное программное обеспечение для анализа состава и структуры неорганических веществ и материалов	Контрольные работы. Устное собеседование на зачете.
ВЛАДЕТЬ: информацией о	Отсутствие навыков	Фрагментарное владение	В целом хорошее, но не систематическое	В целом успешное владение, но	Успешное и систематическое	Контрольные работы.

<p>возможностях методов, их точности и ограничениях, иметь представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов Код В1 (МПК-5)</p>		<p>информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов</p>	<p>владение информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов</p>	<p>содержащее отдельные пробелы, информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов</p>	<p>применение информации о возможностях методов, их точности и ограничениях, представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов</p>	<p>Устное собеседование на зачете.</p>
<p>ВЛАДЕТЬ: навыками работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических веществ и материалов Код В2 (МПК-5)</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное применение навыков работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение навыков работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических</p>	<p>Успешное и систематическое применение навыков работы на современном научном дифрактометрическом и спектроскопическом оборудовании при исследовании неорганических веществ и</p>	<p>Контрольные работы. Устное собеседование на зачете.</p>

		веществ и материалов	веществ и материалов	веществ и материалов	материалов	
--	--	----------------------	----------------------	----------------------	------------	--

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИИ У ОБУЧАЮЩЕГОСЯ

Итоговый контроль сформированности компетенции – государственный экзамен, ВКР

Промежуточная аттестация (зачет, экзамен) согласно учебному плану: зачет