

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1143555	Современная рентгенография и нейтронография

Екатеринбург

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Химия	<b>Код ОП</b> 1. 04.04.01/33.02
<b>Направление подготовки</b> 1. Химия	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 04.04.01

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Петрова Софья Александровна	кандидат физико- математических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Современная рентгенография и нейтронография

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает в себя одноименную дисциплину. Основной задачей модуля является формирование у студентов знания общих принципов рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа материалов: основ структурной кристаллографии и кристаллохимии, общей теории дифракции на трехмерной решетке, понятия обратной решетки; понимания особенностей дифракции разного вида излучений, применительно к исследованию строения упорядоченных и неупорядоченных веществ; знания основ рентгенодифракционных методов исследования; способностей применять современные дифракционные методы для определения фазового состава и структуры химических соединений

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Современная рентгенография и нейтронография	6
ИТОГО по модулю:		6

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Современные физико-математические теории и модели описания вещества</li><li>2. Современные физико-математические теории и модели описания вещества</li></ol>

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Современная рентгенография и	ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и	З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и

нейтронография	<p>прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
	<p>ПК-1 - Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов решения научно-исследовательских задач в выбранной области профессиональной деятельности</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов планирования научно-исследовательской работы</p> <p>У-1 - Выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения</p>

		<p>поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p> <p>У-2 - Составлять общий план научно-исследовательской работы и детальные планы ее отдельных стадий</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения поставленных задач и прогнозирования результатов исследования, исходя из наличия материальных и временных ресурсов</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования НИР в целом и отдельных стадий НИР</p>
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<p>З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>
	<p>ПК-3 - Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии или смежных науках</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов анализа и систематизации результатов НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Определять возможные направления развития теоретических и экспериментальных работ и перспективы практического применения полученных результатов в своей профессиональной области</p> <p>У-2 - Систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными</p>

		<p>П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с учетом практического применения результатов</p> <p>П-2 - Иметь опыт анализа полученных экспериментальных и/или теоретических результатов собственного исследования в сравнении с литературными данными</p>
	<p>ПК-4 - Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения технологических задач</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов организации и планирования материально-технического сопровождения НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-2 - Планировать отдельные стадии и работу в целом, организовать материально-техническое сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования отдельных стадий НИР и НИОКР и работы в целом, материально-технического сопровождения прикладных НИР и НИОКР</p>
	<p>ПК-5 - Способен осуществлять документальное сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Привести примеры нормативных документов по системам стандартизации, разработки и производства химической продукции, проведения прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Готовить документацию по подготовке, проведению и результатам прикладных НИР и НИОКР, анализировать имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производства химической продукции</p>

		П-1 - Иметь навыки работы с нормативной документацией по разработке и стандартизации химической продукции, проведению и результатам прикладных НИР и НИОКР
--	--	--

### **1.5. Форма обучения**

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Современная рентгенография и**  
**нейтронография**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Петрова Софья Александровна	кандидат физико- математических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра аналитической химии

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.



# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Петрова Софья Александровна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Введение	Природа и свойства рентгеновских лучей. Источники рентгеновского излучения. Спектры рентгеновского излучения. Поглощение и рассеяние рентгеновских лучей веществом. Радиационная безопасность. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнения Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга.  Нейтрон и его свойства. Нейтронные источники. Сечение взаимодействия нейтронов. Когерентное и некогерентное рассеяние. Поглощение и замедление нейтронов.  Структура кристалла и пространственная решетка. Кристаллографические проекции. Кристаллографические категории, сингонии и системы координат. Точечные группы симметрии. Решетки Браве. Пространственные группы симметрии. Классификация и обозначения структурных типов. Изоструктурность и изотипия. Кристаллографические интернациональные таблицы.
2	Экспериментальные дифракционные методы	Основные экспериментальные методики для анализа структуры. Геометрия Лауэ (полихроматический). Геометрия вращения и качания. Геометрия Вайсенберга. Метод фотографирования обратной решетки. Прямая и обратная решетка. Основные свойства обратной решетки. Дифрактометрия.  Метод порошка. Принципиальные основы. Современные методы съемки порошков: порошковые дифрактометры,

		<p>фокусирующие камеры. Геометрия съемки с параллельным пучком, синхротронное излучение и порошковая дифракция. Малоугловое рассеяние.</p> <p>Современная рентгеновская дифракционная аппаратура. <math>\theta</math>-<math>2\theta</math> и <math>\theta</math>-<math>\theta</math> дифрактометры. Виды фокусировки. Фокусировка по Брэггу-Брентано. Монохроматизация излучения. Способы формирования параллельного пучка. Зеркало Гёбеля. Способы регистрации рентгеновского излучения. Позиционно-чувствительные детекторы.</p> <p>Порошковая дифракция нейтронов. Источники нейтронов. Дифрактометры. Сравнение дифрактометров с постоянной длиной волны и времяпролетных. Малоугловое рассеяние нейтронов. Нейтронографическая топография и рефлектометрия.</p> <p>Двумерная порошковая дифракция (2D-XRD). Дифракционная картина, измеряемая площадным детектором. Сравнение между 2D-XRD и обычной XRD.</p> <p>Порошковая дифракция в нестандартных условиях. Порошковая дифракция <i>in situ</i>. Процессы, представляющие интерес. Высоко- и низкотемпературная рентгенография. Аппаратура высокого давления. Дифракция порошков во внешних электрических и магнитных полях. Камеры для исследования <i>in situ</i> химических реакций.</p> <p>Автоматизация эксперимента. Форматы экспериментальных данных. Пакеты прикладных программ.</p> <p>Пробоподготовка. Подготовка поликристаллического образца для рентгеновской дифракции (XPD). Порошки и статистика частиц (зернистость). Предпочтительная ориентация (текстура). Поглощение (шероховатость поверхности), микропоглощение и экстинкция. Держатели. Подготовка поликристаллического образца для нейтронной дифракции (NPD). Форма образца. Размер образца. Содержимое образца. Изотопы, поглощение и активация. Особенности работы с малым количеством образца. Особенности приготовления образца для температурной камеры. Выбор условий съемки и проведение эксперимента.</p>
3	<p>Качественный и количественный фазовый анализ</p>	<p>Первичная обработка экспериментальных данных. Определение положения линий дифракционного спектра. Программы первичной обработки. Кластеризация и визуализация данных порошковой дифракции.</p> <p>Качественный фазовый анализ. Метод Финка. Метод Ханавальта. Чувствительность качественного анализа. Штрих-диаграммы. Справочная литература. Кристаллографические базы структурных и дифракционных данных. База данных порошковой дифракции (PDF). Кембриджская структурная база данных (CSD). Неорганическая база данных кристаллических структур (ICSD). База данных металлов (CRYSTMET). Банк данных белков (PDB). Открытая кристаллографическая база данных (COD). Системы поиска. Работа с базами данных. Интернет-ресурсы.</p>

		<p>Методы количественного фазового анализа (QPA). Абсорбционно-дифракционный метод. Метод внутреннего стандарта. Методы соотношения интенсивности эталонов. Метод промывки матрицы. Методы подгонки полного шаблона. QPA на основе метода Ритвельда. Программы для проведения качественного и количественного фазового анализа.</p>
4	<p>Определение параметров кристаллической решетки. Решение прикладных задач</p>	<p>Определение межплоскостных расстояний. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Определение параметров элементарной ячейки по данным порошковой рентгеновской и нейтронной дифракции. Полнопрофильный метод. Монокристалльные методы. Оценка качества дифракционного спектра. Стандартные образцы для порошковой дифракции. Систематические и случайные погрешности. Съемка с эталоном. Программы для расчета.</p> <p>Индексирование дифрактограмм, снятых по методу порошка. Методы индексирования. Законы погасания рефлексов. Число линий на дифрактограмме. Графическое и аналитическое индексирование. Автоиндексирование. Программы автоиндексирования.</p> <p>Изучение фазовых превращений. Построение диаграмм состояния. Исследование условий образования твердых растворов. Закон Вегарда. Определение коэффициентов термического расширения. Исследование кинетики химических реакций.</p> <p>Профили пиков в порошковой дифракции: для излучения постоянной длины волны, нейтронных времяпролетных экспериментов и рентгеновских энергодисперсионных экспериментов. Уширение линий от образца. Анализ микроструктурных эффектов: размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) и микронапряжений в кристаллах. Определение кинетики роста ОКР.</p>
5	<p>Определение структуры</p>	<p>Обзор используемых в настоящее время методов определения структуры по данным порошковой дифракции. Определение структурных факторов из интенсивностей дифракционных максимумов. Методы определения координат атомов в кристалле. Уточнение структурных параметров. Метод Ритвельда. Уточнение по Ритвельду в сравнении с монокристаллическим уточнением. Основные положения и формулы. Механизм подгонки по Ритвельду. Критерии качества уточнения структуры. Возможности и ограничения метода. Порядок введения параметров при подгонке. Исходные инструментальные и структурные данные. Методы оценки стартовых величин. Профильный анализ. Характеристики дифракционного пика на рентгенограмме. Функции профиля, полуширина, асимметрия. Метод фундаментальных параметров. Бесструктурное уточнение. Пример уточнения методом Ритвельда по данным нейтронной порошковой дифракции. Исследование магнитного порядка.</p> <p>Программы уточнения кристаллической структуры вещества по методу Ритвельда. Анализ электронной плотности. Метод</p>

		<p>моделируемого отжига. Метод зарядового перескока. Программы визуализации кристаллической структуры.</p> <p>Рентгенография жидкостей. Функция радиального распределения. Наноматериалы. Тонкие пленки. Исследование текстуры. Несоразмерные и модулированные структуры.</p>
--	--	---

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Современная рентгенография и нейтронография

#### Электронные ресурсы (издания)

1. ; Современные методы структурного анализа веществ : учебник.; Издательство Южного федерального университета, Ростов-на-Дону; 2009; <http://www.iprbookshop.ru/47135.html> (Электронное издание)
2. Журавель, , Л. В.; Рентгенография металлов и сплавов : лабораторный практикум.; Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ, Самара; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/91793.html> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Ковба, Л. М.; Рентгенография в неорганической химии : учебное пособие для вузов.; МГУ, Москва; 1991 (14 экз.)
2. Горелик, С. С., Расторгуев, Л. Н., Скаков, Ю. А.; Рентгенографический и электронно-оптический анализ : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям 550500-Металлургия, 651300-Металлургия, 651800-Физ. материаловедение.; МИСИС, Москва; 2002 (38 экз.)
3. Новиков, И. И., Новиков, А. И., Строганов, Г. Б.; Металловедение, термообработка и рентгенография : Учеб. для металлург. и машиностроит. специальностей вузов.; МИСИС: Metallurgy, Москва; 1994 (14 экз.)
4. ; Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия : учеб. для вузов по специальности "Физика металлов" и "Металловедение, оборудование и технология терм. обраб. металлов".; Metallurgy, Москва; 1982 (92 экз.)
5. , Филонова, Е. А., Пирогов, А. Н.; Элементы структурного анализа. Метод Fullprof как один из методов обработки дифракционных данных : метод. указ. для студентов хим. фак.; [б. и.], Екатеринбург; 2005 (39 экз.)
6. Изюмов, Ю. А.; Магнитная нейтронография; Наука, Москва; 1966 (11 экз.)
7. Пирогов, А. Н.; Структурная и магнитная нейтронография : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2020 (5 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Academic Search Ultimate EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com>

ООО Научная электронная библиотека <https://elibrary.ru>

Издательство "Лань" <http://e.lanbook.com/>

### **Материалы для лиц с ОВЗ**

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### **Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

Bilbao Crystallographic Server <https://www.cryst.ehu.es/>

Crystallography Open Database <http://www.crystallography.net/cod/>

International Union of Crystallography <https://www.iucr.org/>

## **3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Современная рентгенография и нейтронография**

#### **Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

Таблица 3.1

<b>№ п/п</b>	<b>Виды занятий</b>	<b>Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Перечень лицензионного программного обеспечения</b>
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся	OriginPro Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Acrobat 8.0 Pro Russian Version Win Full Educ
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся	OriginPro Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Acrobat 8.0 Pro Russian Version Win Full Educ
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	OriginPro

		<p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p>	<p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Acrobat 8.0 Pro Russian Version Win Full Educ</p>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p>	<p>OriginPro</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Acrobat 8.0 Pro Russian Version Win Full Educ</p>
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p>	<p>OriginPro</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Acrobat 8.0 Pro Russian Version Win Full Educ</p>