

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«22» мая 2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Структурная характеристика конструкционных и функциональных  
материалов**

**Уровень высшего образования:**  
Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Химия твердого тела

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 12.05.2020)

Москва 2020

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры), утвержденного приказом МГУ от 30 августа 2019 года № 1033.

Год (годы) приема на обучение 2020/2021

---

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>СПК-2.М.</b> Способен применять теоретические основы методов исследования, знание устройства и принципов работы современного оборудования для изучения строения и свойств твердых веществ и материалов; разрабатывать новые методики получения и обработки данных	<b>СПК-2.М.1.</b> грамотно выбирает методы и приборы для изучения состава, строения и свойств твердых веществ и материалов	<b>Знать:</b> теоретические основы методов исследования структуры твердофазных материалов. <b>Знать:</b> принципы работы и устройства приборов и установок, используемых для изучения структуры твердофазных материалов <b>Уметь:</b> идентифицировать кристаллические фазы по набору дифракционных данных

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов занятия лекционного типа, 17 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – текущий контроль успеваемости, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

**Знать:** общие положения, законы и теории физики, неорганической химии, кристаллохимии.

**Уметь:** пользоваться компьютером для решения научных задач

**Владеть:** способами математического описания физических и химических процессов.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

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

форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		из них					из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1	10	3	3				6			4
Тема 2	12	4	4				8			4
Тема 3	12	4	3			1	8	4		4
Тема 4	10	3	3				6			4
Тема 5	10	3	2			1	6	4		4
Тема 6	6	2	2				4			2
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	12			2		2	4			8
<b>Итого</b>	<b>72</b>	19	17	2		4	<b>42</b>			<b>30</b>

Содержание тем:

Тема 1. Общие принципы рентгendifракционного исследования. Свойства рентгеновского излучения. Источники рентгеновского излучения, детекторы, устройство гониометров, фокусировка и коллимирование рентгеновских лучей. Условия приготовления образца в зависимости от геометрии регистрации дифрактограммы. Представление о нейтронографическом эксперименте.

Тема 2. Положение и интенсивность дифракционных максимумов. Математическое описание дифракции рентгеновских лучей, формализм обратной решетки. Рассеяние атомом и кристаллом. Аномальное рассеяние. Систематические погасания. Причины смещения дифракционных линий. Эффект преимущественной ориентации.

Тема 3. Процедура обработки порошковой дифрактограммы: сглаживание, автоматический поиск дифракционных максимумов (пиков), вычитание  $K\alpha_2$ . Алгоритмы идентификации известных фаз по положению пиков. Корундовое число. Количественный анализ дифрактограммы методом Ритвелда: функции фона и профиля, последовательность и критерии уточнения. Определение параметров неизвестных элементарных ячеек.

Тема 4. Определение и уточнение кристаллических структур по порошковым дифракционным данным. Метод симулированного отжига.

Тема 5. Определение и уточнение кристаллических структур по монокристалльным данным. Общая постановка задачи. Метод Паттерсона. Прямые методы. Уточнение структуры методом наименьших квадратов.

Тема 6. Определение размеров кристаллитов и микронапряжений при анализе профиля дифракционных пиков. Формула Шерера, понятие об области когерентного рассеяния. Учет размеров кристаллитов и микронапряжений в псевдо-функции Фогта.

#### 6. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций, а также лекции-демонстрации проблемного характера, посвященные методам обработки дифрактограмм. В ходе семинарских занятий студенты решают задачи, нацеленные на практическое усвоение лекционного материала, обсуждают предложенные преподавателем проблемы, а также отвечают на вопросы преподавателя.

#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы (руководства к выполнению конкретных заданий) размещаются на сайте кафедры общей химии:

[www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html).

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

1. Баландин С.В., Гречников А.А., Грибов Л.А., Ефимова Ю.А., Ищенко А.А., Лукьянов А.Е., Мартынов Л.Ю., Мельникова Д.Н., Миронова Е.В., Овчинникова Т.В., Проскурнин М.А., Соловов Р.Д., Темердашев А.З., Усачёв М.Н., Фетисов Г.В., Финкина Е.И., Фогт Н.Ю., Штыков С.Н. Аналитическая химия. В 3 т. Т.3. Инструментальные методы анализа. Часть 2 *Физматлит Москва*, 2020, ISBN 978-5-9221-1867-5, 504 с.

2. Алов Н.В., Василенко И.А., Гольдштрах М.А., Гречников А.А., Ерохин Е.В., Ищенко А.А., Каменев А.И., Колотов В.П., Лазов М.А., Ловчиновский И.Ю., Лукьянов Е.А., Миронова Е.В., Петров А.А., Пестов С.М., Рысев А.П., Сергеев Н.М., Фетисов Г.В., Фогт Н.Ю. Аналитическая химия. В 3 т. Т.2. Инструментальные методы анализа. Часть 1. *ФИЗМАТЛИТ*, Москва, 2019, ISBN 978-5-9221-1866-8, 472 с.

### Дополнительная литература

1. Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. *Физматлит Москва*, 2007, ISBN 978-5-9221-0805-8, 672 с.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
  - База структурных и термодинамических данных для бинарных систем Pauling File
  - Программа визуализации структур неорганических веществ Diamond
  - База данных: Springer Materials Landolt-Börnstein Database <http://www.springermaterials.com/docs/index.html>
  - Сайт разработки программы FullPROF: [www.ill.eu/sites/fullprof](http://www.ill.eu/sites/fullprof)

**Материально-техническое обеспечение:** занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами), персональным компьютером и мультимедийным проектором

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

д.х.н., профессор Яценко Александр Васильевич (495)9393654

### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

### Вопросы для зачета:

1. Принцип работы, устройство и спектр рентгеновской трубки.
2. Типы дифрактометров, их оптические схемы.
3. Монохроматизация и коллимирование рентгеновского излучения в дифрактометрии.

4. Типы детекторов в дифрактометрии и принципы их работы.
5. Рассеяние рентгеновских лучей электроном и атомом. Фактор атомного рассеяния. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей, дисперсионные поправки.
6. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Формула Вульфа-Брэгга. Индексы рефлексов.
7. Структурный фактор и структурная амплитуда рефлекса. Температурный фактор. Интенсивность рефлекса.
8. Закон Фриделя, причины нарушения закона Фриделя в результате аномального рассеяния.
9. Систематические погасания, определение пространственных групп по погасаниям.
10. Порошковая дифрактограмма, положения на ней дифракционных линий, систематические сдвиги и их причины.
11. Интенсивность линий на порошковой дифрактограмме. Приборные факторы, неструктурные факторы, связанные с образцом, и факторы, обусловленные его кристаллической структурой.
12. Идентификация известных фаз по дифракционным данным.
13. Функции, используемые для аналитической аппроксимации фона и профиля рефлексов.
14. Определение неизвестных параметров элементарной ячейки по порошковым дифракционным данным. Представления о методах индентирования, лежащих в основе трех важнейших программ: DICVOL, TREOR и ITO.
15. Уточнение структур методом Ритвелда. Уточняемые параметры. Критерии уточнения, стандартные ошибки определения уточняемых параметров и проблема серийных корреляций.
16. Методы определения количественного состава многофазного образца.
17. Учет преимущественной ориентации кристаллитов.
18. Определение из дифракционных данных размеров и формы кристаллитов, а также напряжений кристаллической решетки.
19. Порошковая дифрактометрия с использованием синхротронного излучения: дополнительные возможности.
20. Нейтронография. Законы рассеяния тепловых нейтронов. Возможности нейтронографии.
21. Монокристалльная дифрактометрия. Принцип устройства монокристалльного дифрактометра.
22. Принципы определения структур прямыми методами по монокристалльным данным.

**Практические контрольные задания для зачета:**

1. По предложенной рентгенограмме определите известную фазу
2. По предложенной рентгенограмме определите возможную пространственную группу
3. Предскажите систематические погасания для данной пространственной группы

**Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
<b>Оценка</b>	2	3	4	5

Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
Знать: теоретические основы методов исследования структуры твердофазных материалов. Знать: принципы работы и устройства приборов и установок, используемых для изучения структуры твердофазных материалов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь: идентифицировать кристаллические фазы по набору дифракционных данных	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос и выполнение ПКР на зачете