

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет  
Кафедра неорганической химии

УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научно-методической  
и учебной работе

*Е.И. Скафа*  
«22» апреля 2020 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Рентгенофазовый анализ

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	—
Образовательная программа:	бакалавриат
Квалификация:	академический бакалавр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020

**УТВЕРЖДАЮ:**

Декан химического факультета

А.В. Белый

«16» апреля 2020 г.



Программа учебной дисциплины «Рентгенофазовый анализ» составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (ГОС ВПО) Донецкой Народной Республики (ДНР) по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 454 от «20» апреля 2016 г.; порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.; учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.03.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчики:

Доцент кафедры неорганической химии, к.х.н.

Ассистент

Н.В. Яблочкова

К.А. Чебышев

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры неорганической химии

Протокол № 8 от «18» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

А.В. Игнатов

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

## 1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Учебная дисциплина «Рентгенофазовый анализ» относится к дисциплинам по выбору студента. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами – математика, физика, неорганическая химия, физическая химия, квантовая химия, строение вещества.

### Нормативные ссылки (при необходимости)

Программа учебной дисциплины «Рентгенофазовый анализ» составлена на основе:

1. ГОС ВПО по направлению подготовки 04.03.01 Химия;
2. «Положения об организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики», утверждённого приказом Министерства образования и науки ДНР «30» октября 2015 г. № 750.

## 2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Характеристика учебной дисциплины	очная форма обучения на базе		заочная форма обучения на базе		
	ОСО	СПО (сокращ.)	ОСО	СПО (сокращ.)	ВПО (сокращ.)
Образовательный уровень:	Бакалавр				
Направление подготовки (специальность)	04.03.01 Химия				
Профиль					
Количество содержательных модулей (тем)	2				
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	Дисциплина по выбору студента				
Формы контроля	Текущий, модульный, экзамен				
Показатели	очная форма обучения на базе		заочная форма обучения на базе		
	ОСО	СПО (сокращ.)	ОСО	СПО (сокращ.)	ВПО (сокращ.)
Количество зачетных единиц (кредитов)	3				
Количество часов	108				
Год подготовки	4				
Семестр	8				
Количество часов	60				
- лекционных	36				
- практических, семинарских	-				
- лабораторных	24				
- самостоятельной работы	48				
в т.ч. индивидуальное задание					
Недельное количество часов, т.ч.	7				
аудиторных	5				

ОСО – общее среднее образование

СПО – среднее профессиональное образование

ВПО – высшее профессиональное образование

### 3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### Цели и задачи

**Цель** – приобретение студентами навыков определения фазового состава нанопорошков с помощью рентгенофазового анализа, как основного метода определения состава твердых веществ.

**Задачи** – 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 и съемки рентгенограмм нанопорошков; анализ и расшифровка рентгенограмм образцов неизвестного состава методом сравнения с рентгенограммами эталонов, индентирование рентгенограмм кристаллов различных сингоний.

**Требования к результатам освоения дисциплины:** Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО по данному направлению подготовки (профилю):

#### **а) общекультурных (ОК):**

- способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОК-6);
- способностью к самоорганизации и самообразованию (ОК-7);

#### **б) общепрофессиональных (ОПК):**

- способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
- владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);
- способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4);
- способностью к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации (ОПК-5);
- знанием норм техники безопасности и умением реализовать их в лабораторных и технологических условиях (ОПК-6).

#### **в) профессиональных (ПК) :**

##### **научно-исследовательская деятельность:**

- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам (ПК-1);
- владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований (ПК-2);
- владением системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);
- способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4);
- способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5);
- владением навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций (ПК-6);

- владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств (ПК-7);

**производственно-технологическая деятельность:**

- способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач (ПК-8);
- владением навыками расчета основных технических показателей технологического процесса (ПК-9).

**В результате изучения учебной дисциплины студент должен.**

***Знать:***

- основные свойства кристаллов, симметрии и геометрии кристаллических многогранников;
- методы описания кристаллической структуры при помощи кристаллической решетки, теории плотнейших шаровых упаковок и координационных полиэдров;
- основные структурные типы простых веществ, бинарных и некоторых тернарных соединений;
- как связана кристаллическая структура с составом, химической связью и свойствами простых веществ и соединений.

***Уметь:***

- выбирать анод и фильтр;
- промерять и рассчитывать рентгенограмму;
- провести фазовый анализ с помощью электронной базы данных.

***Владеть:***

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

#### **4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА**

Курс дисциплины "Рентгенофазового анализа" предусматривает следующие формы организации учебного процесса:

- лекции,
- лабораторные занятия,
- самостоятельная работа студента.

Материал излагается с использованием словесных, объяснительно-иллюстративных, эвристических, проблемных и исследовательских методов преподавания. При проведении лекций для обсуждения материала широко используются мультимедийные презентации, анимации, а также раздаточные материалы. Во время лабораторных занятий создаются проблемные ситуации, рассматриваются задачи максимально приближенные к практике, для самостоятельной работы предлагаются творческие задания. Рассматриваются примеры реакций и механизмы дефектообразования в твердых телах.

В учебном процессе широко применяются активные и интерактивные формы проведения занятий (демонстрации химических реакций в твердых телах, разбор закономерностей протекания твердофазных процессов, дискуссия, полемика), внеаудиторная самостоятельная работа, балльно-рейтинговая система оценки успеваемости, личностно-ориентированное обучение, проблемное обучение, блочно-модульное обучение. Использование в учебном процессе наглядного материала по данному курсу; рассмотрение различных типов теоретических и практических задач, наглядно демонстрирующих связь химии с жизнью, химического эксперимента, тестов. Для выполнения лабораторных работ на кафедре неорганической химии имеется рентгеновская установка диффрактометр ДРОН-3.

Самостоятельная работа студентов предусматривает выполнение индивидуальных заданий, подготовку к лабораторным занятиям, изучение учебной и методической литературы.

## **МОДУЛЬ 1**

### **Содержательный модуль 1. Физика рентгеновского излучения.**

Тема 1. Введение. Открытие Рентгеном нового вида лучей (1895). Установление их природы Лауэ. Открытие Дебаем и Шеррером метода порошка. Преимущества и недостатки методов монокристалла и порошка.

Тема 2. Спектры испускания. Спектры сплошной и характеристический. Напряжение возбуждения. Компоненты рентгеновских полос, их взаимное расположение и интенсивности. Интенсивность сплошного и характеристического излучения. Выбор напряжения на аноде трубки. Закон Мозли.

Тема 3. Спектры поглощения. Виды взаимодействия рентгеновских лучей с веществом: образование электрон - позитронных пар, фотоэлектрический эффект, рассеивание рентгеновских лучей. Поглощение рентгеновских лучей веществом. Коэффициент поглощения: линейный, массовый, атомный. Их зависимость от положения элемента в периодической системе. Аналитическое и графическое описание спектра поглощения. Край полосы поглощения. Факторы, которые влияют на коэффициент поглощения.

Тема 4. Спектры в рентгенофазовом анализе. Выбор материала анода и фильтра для рентгеновского излучения по спектрам поглощения и испускания. Уравнение Вульфа-Бреггов. Использование уравнения и его значение для рентгеновского анализа.

### **Содержательный модуль 2. Аппаратура для рентгеновского анализа.**

Тема 5. Способы регистрации рентгеновского излучения. Принцип фотографического и ионизационного способа регистрации. Пропорционные и сцинтилляционные счетчики.

Тема 6. Рентгеновские установки. Рентгеновские камеры. Диффрактометры. Монохроматизация излучения.

## **МОДУЛЬ 2**

### **Содержательный модуль 3. Фазовый анализ.**

Тема 7. Промер и расчет рентгенограмм в зависимости от способа регистрации. Расчет величин межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей.

Тема 8. Методика фазового анализа. Картотека ASTM, ICPDS.

### **Содержательный модуль 4. Индицирование рентгенограмм.**

Тема 9. Уравнение для индицирования. Вывод уравнения взаимосвязи между параметрами ячейки, межплоскостными расстояниями и индексами плоских сеток для рыхлых сингоний.

Тема 10. Индицирование рентгенограмм кубической сингонии.

Тема 11. Индицирование рентгенограмм тетрагональной сингонии.

Тема 12. Индицирование рентгенограмм гексагональной сингонии.

Тема 13. Методы индицирования ромбической и моноклинной сингонии. Индицирование рентгенограмм методом подбора изоструктурного соединения и методом гомологии. Критерии надежности индицирования.



### Тематический план

Содержательный модуль 1												
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма						Заочная форма					
							на базе общего среднего образования					
	всего	В Т.Ч.					всего	В Т.Ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
<i>Тема 1.</i> Введение	8	2	-	2	4	-						
<i>Тема 2.</i> Спектры испускания.	8	2	-	2	4	-						
<i>Тема 3.</i> Спектры поглощения.	8	2	-	2	4	-						
<i>Тема 4.</i> Спектры в рентгено-фазовом анализе.	8	2	-	2	4	-						
<i>Тема 5.</i> Способы регистрации рентгеновского излучения.	8	2	-	2	4	-						
<i>Тема 6.</i> Рентгеновские установки.	11	4	-	2	5	-						
<i>Итого по 1 содержательному модулю</i>	51	14	-	12	25	-						

Содержательный модуль 2												
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма						Заочная форма					
							на базе общего среднего образования					
	всего	В Т.Ч.					всего	В Т.Ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
<i>Тема 7.</i> Промер и расчет рентгенограмм	6	2	-	2	2	-	12	-	-	2	10	-
<i>Тема 8.</i> Методика фазового анализа	8	2	-	2	4	-	11	1	-	-	10	-

<b>Тема 9.</b> Уравнение для индицирования	6	2	-	2	2	-	5	-	-	-	5	-
<b>Тема 10.</b> Индицирование рентгенограмм кубической сингонии	10	4	-	2	4	-	6	1	-	-	5	-
<b>Тема 11.</b> Индицирование рентгенограмм тетрагональной сингонии	9	4	-	2	3	-	5	-	-	-	5	-
<b>Тема 12.</b> Индицирование рентгенограмм гексагональной сингонии	9	4	-	1	4	-	8	1	-	2	5	-
<b>Тема 13.</b> Методы индицирования ромбической и моноклинной сингонии	9	4	-	1	4	-	4	-	-	-	4	-
<b>Итого по 2 содержательному модулю</b>	57	22	-	12	23	-	51	3	-	4	44	
<b>Всего часов по дисциплине</b>	108	36	-	24	48	-	108	8	-	6	94	



## 5. Темы лабораторных занятий

№ П/П	Название темы	Кол-во часов
1	Выбор излучения и фильтра.	4
2	Промер рентгенограмм.	4
3	Расчет рентгенограмм. Построение штрих рентгенограмм.	4
4	Фазовый анализ смеси двух веществ.	2
5	Индицирование рентгенограмм кубической сингонии.	2
6	Индицирование рентгенограмм тетрагональной сингонии.	4
7	Индицирование рентгенограмм гексагональной сингонии	2
8	Индицирование рентгенограмм ромбической сингонии	2
	<b>Всего годин</b>	<b>24</b>

## 6. Самостоятельная работа

1. Проработка теоретических основ прослушанного лекционного материала.
2. Подготовка к лабораторным занятиям.
3. Изучение вопросов, которые вынесены на самостоятельную проработку (открытие Дебаем и Шеррером метода порошка, преимущества и недостатки методов монокристалла и порошка, аналитическое и графическое описание спектров поглощения, факторы, которые влияют на поглощение, монохроматизация излучения, картотека ASTM, ICPDS).
4. Систематика изученного материала перед модульным контролем, экзаменом.

## 7. Образец экзаменационного билета

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»  
 Образовательный уровень Бакалавр  
 Направление подготовки 04.03.01 Химия  
 Специальность \_\_\_\_\_ Семестр 8  
 Дисциплина Рентгенофазовый анализ

### ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Рентгеновское излучение. Параметры электромагнитных волн.
2. Способы описания структуры кристаллов. Элементарные ячейки Браве.
3. Твердые электролиты с дефектной структурой. Принцип действия.

Утверждено на заседании

Кафедры неорганической химии

Протокол № \_\_\_\_\_ от „\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_\_\_ года

И.О. завкафедры \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

Игнатов А.В.  
Яблочкова Н.В.

## 8. Критерии оценивания (разрабатываются и утверждаются кафедрой)

Содержание дисциплины «Рентгенофазовый анализ» состоит из двух зачетных модулей. Каждый зачетный модуль состоит из теоретического материала и практических задач, выполнение которых требует овладения теорией в указанном в модуле объеме.

Оценка знаний студентов проводится по 100-балльной шкале согласно следующим критериям:

Зачетные модули	Форма контроля	Баллы
-----------------	----------------	-------

Смысловой модуль 2	Индивидуальная работа по решению задач	5
	Защита лабораторных работ	5
	Модульная работа	15
Смысловой модуль 2	Индивидуальная работа по решению задач	5
	Защита лабораторных работ	5
	Модульная работа	15
Экзамен		50
Общий итог		100

### Шкала оценивания:

Для оценивания академической успеваемости обучающихся в университете использовать шкалу оценивания, рекомендованную приказом МОН ДНР от 30.10.2015г. № 750:

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по гос. шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

### Оценивание ответа на экзамене

**45-50 баллов** – выставляется за глубокие, аргументированные правильно написанные ответы на все вопросы билета в пределах программы дисциплины. Все задачи решены с подробным объяснением, дан полный аргументированный ответ.

**40-44 балла** - выставляется студенту, допустившему 1-2 неточности в ответе. Все задачи решены, объяснение логично и последовательно. На теоретический вопрос дан исчерпывающий ответ.

**35-39 баллов** - выставляется за глубокие, аргументированные ответы на все вопросы в пределах билета, но при этом студент допустил некоторые неточности в пределах 3-4 ошибок, либо 1-2 грубых ошибок.

**30-34 балла** – при 2-3 недочетах, а также, если на 1-2 вопроса даны неполные ответы, а по остальным вопросам знания глубокие и аргументированные. Либо при полном отсутствии ответа на 1 вопрос, а по остальным вопросам знания глубокие и аргументированные.

**25-29 баллов** – выставляется за верные, но недостаточно полные ответы на все вопросы билета, либо за 3-4 грубые ошибки в ответах, или за полное незнание 2 вопросов билета, за отсутствие логического решения 1 задачи.

**20-24 балла** – за грубые ошибки, недочеты, неточности, нелогичность и непоследовательность в изложении материала. Либо если не выполнено 3 вопроса из билета.

**15-19 баллов** - выставляется за незнание 3 вопросов, за грубые ошибки и неточности.

**10-14 баллов** - выставляется за полное незнание более 3-х вопросов билета, или грубые ошибки и недочеты во всех вопросах.

**0-9 баллов** – выставляется за полный отказ от написания билета, либо за полное отсутствие знаний по всем вопросам билета.

### **9. Материально-техническое обеспечение учебного процесса**

Для проведения лекционных занятий требуется аудитория на группу, оборудованная меловой или интерактивной доской, мультимедийным проектором и экраном.

Для обеспечения лабораторных занятий по данному курсу необходима аудитория, оснащенная необходимым оборудованием: муфельными печами типа СНОЛ, аналитическими весами, диффрактометр ДРОН-3.

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

*Методическое обеспечение*

Банк данных изоморфных замещений.

### **10. Рекомендованная литература**

#### **Основная**

1. Ковба Л.М., Трунов В.К. Рентгенофазовый анализ. - М.: МГУ, 2006.- 230с.
2. Миркин Л.И. Справочник по рентгенофазовому анализу поликристаллов. - М.: Физматгиз, 2001.- 869с.
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. Шильгин. – 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.

#### **Дополнительная**

1. Мони́на Л.Н. Рентгенография. Качественный рентгенофазовый анализ: учебное пособие. – Тюмень: ТГУ, 2016. — 120 с.
2. Буланов Е.Н. Рентгенография. Физические основы метода и практическое приложение. Электронное учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород, 2014 – 49 с. [http://www.unn.ru/books/met\\_files/bulanov2014.pdf](http://www.unn.ru/books/met_files/bulanov2014.pdf)
3. Курзина И.А. и др. Рентгенофазовый анализ нанопорошков Методические указания к выполнению лабораторной работы по курсу «Отрасли nanoиндустрии. Области применения наноматериалов» для магистрантов, обучающихся по направлению 150600 «Материаловедение и технология новых материалов». – Томск: ТПУ, 2010. – 14 с.
4. Ищенко А.А., Киселев Ю.М. Рентгенофазовый анализ Учебно-методическое пособие для самостоятельной работы студентов 3-4 курса по дисциплине «Физико-химические методы анализа». — М.: МИТХТ им. М. В. Ломоносова, 2008. - 52 с.
5. Князев А.В. Сулейманов Е.В. Основы рентгенофазового анализа Учебно-методическое пособие. — Нижний Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2005. — 23 с.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры с изменениями (без изменений) на 202\_\_\_\_ год. Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от \_\_\_\_ .  
Зав.кафедрой \_\_\_\_\_