

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Рентгенофазовый анализ

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Томск - 2015

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ДВ.4.1.6. Рентгенофазовый анализ

2. Цели изучения дисциплины

Современные требования к специалисту-химику предполагают владение важнейшими экспериментальными методами. Особое место среди них занимают методы рентгенографии, микроскопии и хроматографии. Рентгеноструктурный анализ - экспериментальная основа современной структурной химии, микроскопия - важнейший аналитический метод, обеспечивающий неразрушающий контроль фазового состава при изучении фазовых равновесий, кинетики и механизма твердофазных реакций, при контроле производства и всевозможных экспертизах.

3. Год и семестр обучения

4 год, 8 семестр

4. **Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа, из которых 32 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (16 часов – занятия лекционного типа, 16 часов – практические занятия), 40 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.**

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-2, I уровень - способность использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	З (ОПК-2) – I Знать - принцип работы рентгеновской установки У (ОПК-2) – I Уметь - выполнять стандартные действия по расчету параметров элементарных ячеек кристаллов средних сингоний
ПК-1, I уровень - приобретение навыков использования теоретических основ традиционных и новых разделов химии при решении задач профессиональной сферы деятельности	З (ПК-1) – I Знать - стандартные методы обработки результатов эксперимента

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия семинарского типа	
Дифракция рентгеновский лучений и дифракционные методы исследования	18	4	-	2	12
Качественный и количественный рентгенофазовый анализ	18	4	-	2	12
Индицирование рентгенограмм	36	8	-	12	16
Итого:	72	16	-	16	40

6.2 Содержание дисциплины

Рентгенофазовый анализ

Дифракция рентгеновских лучей и дифракционные методы исследования. Дифракционные методы исследования и их место в современной науке. Основные задачи, решаемые дифракционными методами. Классификация рентгеновских методов: просвечивание, спектральный, фазовый и структурный анализ и области их применения. Происхождение и природа рентгеновских лучей, рентгеновские трубки, спектры испускания и поглощения, их зависимость от атомных номеров элементов. Бета-фильтры. Рассеяние и суммарное ослабление рентгеновских лучей. Изотопные источники и синхротроны.

Кристаллическое и аморфное состояния вещества, их относительная распространенность и отличительные признаки. Моно- и поликристаллы.

Дифракция на кристаллической решетке. Условия получения интерференционного максимума. Способы регистрации дифракционной картины. Методы Лауэ, вращения кристалла, метод поликристаллов. Камера Дебая.

Принципиальная схема дифрактометра с фокусировкой по Брэггу-Брентано. Монохроматоры. Ионизационные, сцинтилляционные и полупроводниковые детекторы. Координатные детекторы. Источники погрешностей измерения углов, межплоскостных расстояний и интенсивностей, пути повышения точности.

Качественный и количественный рентгенофазовый анализ. Применение рентгенофазового анализа для определения кристаллических характеристик. Использование их для идентификации индивидуального вещества и фаз в смеси.

Рентгенометрические справочники, картотека ICDD, программные продукты для РФА и способы их использования.

Возможные источники грубых ошибок. РФА изоструктурных фаз и твердых растворов. Применение эталонов и метода добавок. Рекомендации по выбору аналитических пар и режимов съемки. Факторы, определяющие чувствительность и точность РФА.

Применения РФА в контроле производства, в экспертизах, в научных исследованиях.

Индицирование рентгенограмм. Индицирование рентгенограмм, расчет параметров элементарных ячеек кристаллов средних сингоний.

Методы экспериментального измерения уширения дифракционных максимумов и оценка среднего размера областей когерентного рассеяния.

6.3 Форма промежуточной аттестации

Зачет

7. Ресурсное обеспечение

а) основная литература:

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия /Ю.К. Егоров-Тисменко; под ред. В.С. Урусова - М.: КДУ, 2010.-588 с.
2. Богдак Т.В., Основы рентгеновской дифрактометрии. М.: изд.-во МГУ. 2012. – 64 с.

б) дополнительная литература:

1. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. - М.: Мир, 1972. – 384 с.

2. Недома И. Расшифровка рентгенограмм порошков. - М.: Metallurgia, 1975. – 424 с.
3. Курзина И. А., Годымчук А. Ю., Качаев А. А. Рентгенофазовый анализ нанопорошков. / Томск. ТПУ. 2010. – 14 с.
4. Батырева В.А., Кузнецова С.А. Основы рентгенофазового анализа. Методические указания. Томск: ТГУ, 2006. – 26 с.
5. Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. Рентгенографический и электроннооптический анализ. - М.: МИСИС. 1994. – 328 с.
6. Ковба Л.М. Рентгенография в неорганической химии. – М.: МГУ, 1991. – 254 с.
7. Ковба Л.М., Трунов В.К. Рентгенофазовый анализ. - М.: МГУ, 1976. - 232 с.
8. Савицкая Л.К. Методы рентгеноструктурных исследований. – Томск: ТГУ, 2003. – 258 с.

в) Интернет-ресурсы:

1. Шмаков Н.А. Основы рентгеноструктурного анализа рентгеноструктурный анализ поликристаллических материалов на синхротронном излучении/ ИК СО РАН им. Г.К. Борескова <http://www.ssrc.inp.nsk.su>.
2. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kovba/welcome.html>
3. Л.М. Ковба, В.К. Трунов Рентгенофазовый анализ. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kovba/welcome.html>
<http://www.vesti.ru/videos/show/vid/491881/cid/1000/>

8. Преподаватель

Автор, канд. хим. наук, доцент В.А. Батырева