

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талорский Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Дифракционные методы изучения химической структуры Б1.В.ДВ.4

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Катаева О.Н.

Рецензент(ы):

Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 7102617

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) Катаева О.Н. , Olga.Kataeva@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины 'Дифракционные методы изучения химической структуры' является изучение основ теории и практики дифракционных методов изучения химической структуры, а также формирование у студентов компетенций, позволяющих осуществлять идентификацию органических соединений, основываясь на данных, полученных с помощью дифракционных методов.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина 'Дифракционные методы изучения химической структуры' изучается на первом курсе в первом семестре обучающимися по направлению 04.04.01 'Химия', профилю 'Хемоинформатика и молекулярное моделирование'. Предполагается, что студенты, изучающие данную дисциплину, прослушали курс 'органическая химия' и 'физическая химия'.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях
ПК-2 (профессиональные компетенции)	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-3 (профессиональные компетенции)	использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные дифракционные методы исследования;
- принцип, на котором основаны дифракционные методы исследования;
- характерные длины волн, тип взаимодействия, исследуемые объекты;
- основные методы детектирования рентгеновского излучения;
- основные этапы рентгеноструктурного анализа монокристаллов;
- положения современной теории строения кристаллов;
- основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины;

- сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа, нейтронографии и электронографии кристаллов.

2. должен уметь:

- выполнять рентгеноструктурный анализ;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью рентгеноструктурного анализа;
- регистрировать и расшифровывать рентгенограммы кристалла и порошка;
- использовать теоретические знания при объяснении результатов химических экспериментов;
- работать с простейшими аппаратами, приборами и схемами, которые используются в лабораториях;
- интерпретировать оптические спектры молекул.

3. должен владеть:

- приемами и методами решения конкретных задач из различных областей химии и физики;
- уметь делать простейшие оценки и расчеты для анализа результатов рентгеноструктурного анализа.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

- применять знания, полученные в результате прохождения данного курса, в своей профессиональной деятельности.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Дифракционные методы исследования. Историческая справка. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография, их особенности.	1		4	0	0	Устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Рентгенография. Рентгеновское излучение. Синхротронное излучение. Методы детектирования рентгеновского излучения. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы. Основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины. Рентгеноструктурный анализ кристаллов.	1		8	8	0	Отчет
3.	Тема 3. Электроннография.	1		4	0	0	Устный опрос
4.	Тема 4. Нейтроннография.	1		2	0	0	Устный опрос
5.	Тема 5. Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования.	1		0	2	0	Коллоквиум
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	Зачет
	Итого			18	10	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Дифракционные методы исследования. Историческая справка. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография, их особенности.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Введение. Дифракционные методы исследования - определение. Историческая справка. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография. Характерные длины волн, тип взаимодействия, исследуемые объекты. Применение дифракционных методов.

Тема 2. Рентгенография. Рентгеновское излучение. Синхротронное излучение. Методы детектирования рентгеновского излучения. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы. Основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины. Рентгеноструктурный анализ кристаллов.

лекционное занятие (8 часа(ов)):

Рентгенография. Природа рентгеновского излучения, методы его получения, природа характеристического излучения и белого излучения рентгеновской трубки. Природа синхротронного излучения. Методы детектирования рентгеновского излучения (фотопленки, сцинтилляционные счетчики, CCD и Image Plate детекторы. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы (основные понятия, без вывода), прямая и обратная решетка. Дифракция рентгеновских лучей кристаллами (по Лауэ и Брэггу), основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины (методы вращения, Лауэ и метод порошка). Структурный фактор, структурная амплитуда, электронная плотность кристалла. Основные понятия, смысл и взаимосвязь структурной амплитуды и электронной плотности. Фактор атомного рассеяния. Влияние температуры на дифракцию рентгеновских лучей кристаллами. Основные этапы рентгеноструктурного анализа (РСА) монокристаллов. Подготовка образца, дифракционный эксперимент, расшифровка кристаллической структуры и фазовая проблема, уточнение структур методом наименьших квадратов. R-фактор в уточнении кристаллических структур и его смысл.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Знакомство с различными модификациями оборудования для РСА, с методикой обработки экспериментальных данных, с базами данных РСА для различных соединений. Регистрация и расшифровка рентгенограмм кристалла и порошка.

Тема 3. Электронография.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Электронография. Уравнения потока электронов для плоских и сферических волн. Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний. Преобразование Фурье в газовой электронографии. Кривая радиального распределения. Рассеяние электронов двухатомной молекулой в гармоническом приближении колебания ядер. Зависимость амплитуды колебания пар ядер от температуры. Уравнения для многоатомных молекул. Схема эксперимента. Условия получения электронограмм. Совместное использование газовой электронографии и микроволновой спектроскопии.

Тема 4. Нейтронография.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Нейтронография. Историческая справка. Структурная нейтронография. Магнитная нейтронография. Применение нейтронографии.

Тема 5. Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Семинар на тему: Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования. Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа, нейтронографии и электронографии кристаллов. Степень размытости максимумов рассеивающей материи. Сходимость рядов Фурье. Зависимость мощности максимумов от атомных номеров. Аппаратура для дифракционных исследований. Требование к исследуемому образцу. Сравнительные возможности дифракционных методов изучения структуры кристаллов и веществ в других агрегатных состояниях. Основные задачи рентгеноструктурного анализа в химии. Стереохимические задачи. Кристаллоструктурные задачи.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Дифракционные методы исследования. Историческая справка. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография, их особенности.	1		подготовка к устному опросу	6	устный опрос
2.	Тема 2. Рентгенография. Рентгеновское излучение. Синхротронное излучение. Методы детектирования рентгеновского излучения. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы. Основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины. Рентгеноструктурный анализ кристаллов.	1		подготовка к отчету	14	отчет
3.	Тема 3. Электронография.	1		подготовка к устному опросу	8	устный опрос
4.	Тема 4. Нейтронография.	1		подготовка к устному опросу	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования.	1		подготовка к коллоквиуму	10	коллоквиум
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

1. Лекции, практические занятия.
2. Коллоквиум.
3. Демонстрация слайдов с применением мультимедийной техники.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение. Дифракционные методы исследования. Историческая справка. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография, их особенности.

устный опрос , примерные вопросы:

1. Определение дифракционных методов исследования.
2. Основные методы дифракционного исследования.
3. На чем основана рентгенография? электронография? нейтронография? 4. Перечислите основные особенности рентгенографии, электронографии и нейтронографии.

Тема 2. Рентгенография. Рентгеновское излучение. Синхротронное излучение. Методы детектирования рентгеновского излучения. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы. Основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины. Рентгеноструктурный анализ кристаллов.

отчет , примерные вопросы:

Регистрация и расшифровка рентгенограмм кристалла и порошка.

Тема 3. Электронография.

устный опрос , примерные вопросы:

1. Объясните, на чем основана электронография.
2. Перечислите основные этапы эксперимента.
3. Каким образом амплитуда колебания пар ядер зависит от температуры? 4. Укажите условия получения электронограмм.

Тема 4. Нейтронография.

устный опрос , примерные вопросы:

1. На чем основана нейтронография? 2. Что такое магнитная нейтронография? структурная нейтронография? 3. Где применяется нейтронография?

Тема 5. Сравнительные возможности и перспективы дифракционных методов исследования.

коллоквиум , примерные вопросы:

Вопросы к коллоквиуму: 1. Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа, нейтронографии и электронографии кристаллов. 2. Степень размытости максимумов рассеивающей материи. 3. Сходимость рядов Фурье. Зависимость мощности максимумов от атомных номеров. 4. Аппаратура для дифракционных исследований. 5. Требование к исследуемому образцу. 6. Сравнительные возможности дифракционных методов изучения структуры кристаллов и веществ в других агрегатных состояниях. 7. Основные задачи рентгеноструктурного анализа в химии. Стереохимические задачи. Кристаллоструктурные задачи.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Три основных дифракционных метода - рентгенография, электронография, нейтронография. Характерные длины волн, тип взаимодействия, исследуемые объекты.
2. Применение дифракционных методов.
3. Рентгенография. Природа рентгеновского излучения, методы его получения, природа характеристического излучения и белого излучения рентгеновской трубки. Природа синхротронного излучения.
4. Методы детектирования рентгеновского излучения (фотопленки, сцинтилляционные счетчики, CCD и Image Plate детекторы).
5. Симметрия и сингонии кристаллов, пространственные группы (основные понятия, без вывода), прямая и обратная решетка.
6. Дифракция рентгеновских лучей кристаллами (по Лауэ и Брэггу), основные принципы и уравнения дифракции, методы получения дифракционной картины (методы вращения, Лауэ и метод порошка).
7. Структурный фактор, структурная амплитуда, электронная плотность кристалла.
8. Основные понятия, смысл и взаимосвязь структурной амплитуды и электронной плотности.
9. Фактор атомного рассеяния.
10. Влияние температуры на дифракцию рентгеновских лучей кристаллами.
11. Основные этапы рентгеноструктурного анализа (РСА) монокристаллов. Подготовка образца, дифракционный эксперимент, расшифровка кристаллической структуры и фазовая проблема, уточнение структур методом наименьших квадратов.
12. R-фактор в уточнении кристаллических структур и его смысл.
13. Различные модификации оборудования для РСА.
14. Методика обработки экспериментальных данных.
15. Базы данных РСА для различных соединений.
16. Регистрация и расшифровка рентгенограмм кристалла и порошка.
17. Электронография. Уравнения потока электронов для плоских и сферических волн.
18. Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний.
19. Преобразование Фурье в газовой электронографии. Кривая радиального распределения.
20. Рассеяние электронов двухатомной молекулой в гармоническом приближении колебания ядер. Зависимость амплитуды колебания пар ядер от температуры.
21. Электронография. Уравнения для многоатомных молекул.
22. Электронография. Схема эксперимента. Условия получения электронограмм.
23. Совместное использование газовой электронографии и микроволновой спектроскопии.
24. Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа, нейтронографии и электронографии кристаллов.
25. Степень размытости максимумов рассеивающей материи.
26. Сходимость рядов Фурье.
27. Зависимость мощности максимумов от атомных номеров.

28. Аппаратура для дифракционных исследований. Требование к исследуемому образцу.
29. Нейтронография.
30. Структурная нейтронография.
31. Магнитная нейтронография.
32. Применение нейтронографии.
33. Сравнительные возможности дифракционных методов изучения структуры кристаллов и веществ в других агрегатных состояниях.
34. Основные задачи рентгеноструктурного анализа в химии. Стереохимические задачи. Кристаллоструктурные задачи.

7.1. Основная литература:

1. Бублик, В.Т. Дифракционные методы изучения материалов и приборных структур. Ионная имплантация. [Электронный ресурс] / В.Т. Бублик, К.Д. Щербачев, М.И. Воронова, А.М. Мильвидский. - Электрон. дан. - М. : МИСИС, 2013. - 67 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/47458>
2. Анищик, В.М. Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.М. Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. - Минск: Выш. шк., 2011. - 215 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=506981>
3. Рентгенография как метод исследования гетерогенных равновесий [Текст : электронный ресурс] : [учебное пособие] / Казан. гос. ун-т ; [сост.: З.М. Латыпов, Р.Г. Фицева, З.З. Ибрагимова ; науч. ред. проф. Н.А. Улахович] .- Электронные данные (1 файл: 1,17 Мб) .- (Казань : Казанский федеральный университет, 2014) .- Загл. с экрана .- Режим доступа: открытый. - URL: <http://libweb.kpfu.ru/ebooks/publicat/0-760472.pdf>

7.2. Дополнительная литература:

1. Современные методы структурного анализа веществ: учебник / Куприянов М.Ф., Рудская А.Г., Кофанова Н.Б. - Ростов-на-Дону:Издательство ЮФУ, 2009. - 288 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=555508>
2. Методы исследования микроэлектронных и нанозлектронных материалов и структур. Часть II/ВеличкоА.А., ФилимоноваН.И. - Новосибир.: НГТУ, 2014. - 227 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=546528>
3. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. [Электронный ресурс] / Фетисов Г. В. - М. : ФИЗМАТЛИТ, 2007. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922108058.html>
4. Порай-кошиц, М.А. Практический курс рентгеноструктурного анализа : учебное пособие. Т. 2 / М. А. Порай-кошиц. - М. : Изд-во Московского университета, 1960. - 632 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

- Crystallography Open Database - Ресурсный центр
International Union of Crystallography - Ресурсный центр
База порошковых данных - <http://icdd.com/>
Курс по кристаллохимии - <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/welcome-cryschem.html>
Ресурсный центр - <http://xrd.spbu.ru/links/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Дифракционные методы изучения химической структуры" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента", доступ к которой предоставлен студентам. Электронная библиотечная система "Консультант студента" предоставляет полнотекстовый доступ к современной учебной литературе по основным дисциплинам, изучаемым в медицинских вузах (представлены издания как чисто медицинского профиля, так и по естественным, точным и общественным наукам). ЭБС предоставляет вузу наиболее полные комплекты необходимой литературы в соответствии с требованиями государственных образовательных стандартов с соблюдением авторских и смежных прав.

монокристалльный дифрактометр Карра Арех 2 (Брукер).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Катаева О.Н. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.