

**Программа утверждена на заседании
Ученого Совета факультета наук о
материалах МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 213 от 27 июня 2019 г.**

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Синхротронное излучение в рентгеновской спектроскопии и рентгеновской дифракции.**

Краткая аннотация: В лекциях рассмотрены принципы получения и основные характеристики рентгеновского синхротронного излучения, его использование в рентгеновской дифракции и рентгеновской спектроскопии. Самостоятельная работа включает ознакомление с основными рентгенодифракционными и рентгеноспектроскопическими методами исследования вещества на материале лекций и научных публикаций.

Цели и задачи освоения дисциплины.

Цель: наиболее распространенных

Рассмотреть принципы выработки электромагнитного излучения на ускорителях легких заряженных частиц (синхротронного излучения, СИ) и особенности взаимодействия СИ рентгеновского диапазона с веществом. Охарактеризовать основные методы рентгеновской спектроскопии (спектры поглощения, рентгенофлуоресцентный анализ, рентгенофотоэлектронная спектроскопия, XAFS-спектроскопия) и рентгеновской дифракции (монокристаллическая и порошковая дифрактометрия) с использованием СИ.

Задачи: Сформировать у слушателей базовые представления об особенностях рентгеновских инструментальных методов, использующих СИ, в рамках единой и общепринятой терминологии. Выработать навыки практического анализа рентгеноспектроскопических и рентгенодифракционных данных.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленность (профиль) Неорганическая химия, Химия твердого тела

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;	31 (УК-1) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, связанных с исследованием

	твёрдофазных превращений
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность с использованием дифракционных и спектроскопических данных на СИ, применяя современные методы обработки и анализа данных	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности основные закономерности взаимодействия рентгеновского СИ с веществом
ПК-1 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.01 Неорганическая химия	З1 (ПК-1, ПК-16) Знать основы рентгеновской спектроскопии поглощения, рентгеноэмиссионной и рентгенофотоэлектронной спектроскопии, XAFS-спектроскопии, а также рентгенодифракционных методов на СИ
ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твёрдого тела	У1 (ПК-1, ПК-16) Уметь использовать спектроскопические и дифракционные данные в исследовании атомной и электронной структуры конденсированных фаз. В1 (ПК-1, ПК-16) Владеть методами оценки надежности и достоверности данных в указанных физических методах

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся: *Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 24 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (20 часов занятия лекционного типа, 4 часа занятия семинарского типа и тестирования), 84 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.*

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия. В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия», «Кристаллохимия».

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы 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	Самостоятельная работа с научной и учебной литературой	Всего
Тема 1. Выработка рентгеновского синхротронного излучения и его основные характеристики. Составные части и принципы работы накопительного кольца, стандартные параметры работы ускорителей в центрах СИ (вакуум, энергия пучка, электронный ток, время жизни пучка). Принцип выработки СИ и его спектр в поворотных магнитах и вставных магнитных устройствах (виглер, ондулятор, шифтер). Критическая энергия СИ. Поляризация и модулирование СИ. Схема и основные узлы канала СИ	9	2					2		7	7
Тема 2. Взаимодействие рентгеновского СИ с веществом, оптика и детекторы. Спектр электромагнитного излучения, энергии фотонов и длины волн в вакуумном ультрафиолетовом (ВУФ), мягком и жестком рентгеновском диапазонах. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом: упругое рассеяние, неупругое рассеяние, поглощение. Сечение процесса. Особенности рассеяния рентгеновского СИ на совершенных кристаллах.	9	2	2				2	7		7

Брегговские монохроматоры, их энергетическое разрешение, глитчи. Рентгеновские зеркала полного внешнего отражения, многослойные зеркала. Основные типы детекторов рентгеновского СИ.										
Тема 3. Рентгеновские спектры поглощения. Рентгеновская спектроскопия поглощения. Блок-схема спектрометра, происхождение и общий вид полос рентгеновского поглощения, получаемая информация. Спин-орбитальное взаимодействие для электронов на внутренних оболочках атома, квантовое число полного момента. Происхождение рентгеновских термов, их обозначения, время жизни, каналы распада.	9	2					2		7	7
Тема 4 (семинарское занятие). Квантовомеханические модели рентгеновских термов атома и состояний атомного ядра. Квантовые состояния электронов в атоме. Спин-орбитальное взаимодействие, LS- и jj-схемы. Модель трехмерного осциллятора и нуклонные оболочки ядер, магические ядра. Спин атомного ядра.	9	2					2		7	7
Тема 5. Рентгенофлуоресцентная и рентгеноэмиссионная спектроскопия Происхождение и обозначение линий рентгеновской флуоресценции. Общий вид спектра рентгеновской трубки, $\square\square$ -фильтры. Самопоглощение в образце. Рентгенофлуоресцентный анализ на СИ, его возможности и ограничения.	9		2				2	4	3	7

Рентгеноэмиссионная спектроскопия легких элементов.										
Тема 6. Рентгенофотоэлектронная спектроскопия (РФЭС). Блок-схема РФЭС-спектрометра. Вид обзорного спектра, обозначения фотоэлектронных линий и оже-полос. Кинетическая энергия регистрируемых электронов и их энергия связи в атоме, работа выхода. Глубина анализа образца в РФЭС. Химический сдвиг и спин-орбитальное расщепление фотоэлектронных полос. Многоэлектронные эффекты. РФЭС в лабораторном и синхротронном вариантах.	9	2					2		7	7
Тема 7. (практическое занятие) Анализ спектроскопических данных в методах рентгенофлуоресцентного анализа и РФЭС.	9	2					2		7	7
Тема 8. XAFS-спектроскопия: основы метода и его реализации. Спектроскопия XAFS, блок-схема спектрометра. Происхождение тонкой структуры полосы поглощения и главные методики ее регистрации (на пропускание, по выходу рентгеновской флуоресценции, по фототоку), их возможности и аппаратурные особенности. Области XANES и EXAFS, содержащаяся в них информация. Многосферная модель локального окружения поглощающего атома и ее параметры. Основная формула EXAFS и входящие в нее	9	2					2		7	7

величины.										
<p>Тема 9. XAFS-спектроскопия: обработка и использование данных</p> <p>Этапы обработки экспериментальных данных в XAFS-спектроскопии. Осцилляционная функция профиля рентгеновской полосы и ее фурье-трансформанта, фазовые сдвиги координационных сфер. Структурные параметры локального окружения атома, определяемые в EXAFS (радиусы координационных сфер, координационные числа, дебай-уоллеровские факторы; максимальное число варьируемых параметров). Спектроскопия NEXAFS на атомах легких элементов. Возможности и ограничения метода XAFS.</p>	9	2					2		7	7

<p>Тема 10. Рентгеновское рассеяние на некристаллических образцах. Упругое рассеяние рентгеновских фотонов на образце вещества, вектор рассеяния. Интенсивность и амплитуда рассеяния монохроматического рентгеновского излучения, связь амплитуды рассеяния с плотностью рассеивателей в образце. Атомные факторы рассеяния (f-кривые) для различных элементов. Формула Дебая. Парная функция радиального распределения атомов PPA (pair distribution function, PDF) и получаемая из нее структурная информация. Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР, или small-angle X-ray scattering: SAXS): происхождение, блок-схема прибора и получаемая информация. Комбинированные методики SAXS / WAXS и SAXS / WAXS / XAFS.</p>	9	2					2	7	7
<p>Тема 11. Рассеяние рентгеновского СИ на кристаллических образцах. Основы кинематической теории рассеяния. Связь амплитуды рассеяния монохроматического рентгеновского излучения на элементарной ячейке кристалла (структурной амплитуды) с расположением атомов в ячейке. Прямая и обратная задачи теории рентгеновской дифракции. Характеристики качества кристаллической структуры: вид тепловых эллипсоидов, гармонические и ангармонические параметры</p>	9	2					2	7	7

смещений. Прецизионный РСА. Применение СИ в дифракционных исследованиях монокристаллов и поликристаллических образцов. Метод Лауэ. Аномальное рассеяние рентгеновского излучения на атомах. Аномальные поправки к атомному фактору рассеяния, их зависимость от энергии фотонов вблизи края поглощения рассеивающего атома. Использование аномального рассеяния в дифракционных методах (монокристаллическая и порошковая дифрактометрия, ASAXS / AWAXS). Метод многоволновой аномальной дифракции (MAD) в белковой кристаллографии на СИ.										
Тема 12. Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	9		1			1	2	4	3	7
Итого	108	20	3			1	24	8	80	84

8. Образовательные технологии

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций; и семинарские занятия, направленные на практическое использование дифракционных и спектроскопических данных на рентгеновском СИ. Материал лекций составлен на основе базовых и новейших мировых научных результатов, в том числе результатов исследований, проведенных автором.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): Аспирантам предоставляется программа курса, указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Предоставляются годовые сборники отчетов основных синхротронных центров (ESRF, Photon Factory, Daresbury Laboratory, Сибирский центр СИ), материалы конференций по XAFS-спектроскопии и другим рентгеновским методам.

10. Ресурсное обеспечение:

Аудитория, проектор, доска, мел или фломастер.

Самостоятельная работа аспирантов обеспечивается доступом к базам данных и основным поисковым системам, и полнотекстовым статьям в отечественных и зарубежных журналах.

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Г.В.Фетисов *Синхротронное излучение. Методы исследования структуры вещества*, М., Физматлит, 2007.
2. Л.Н.Мазалов. *Рентгеновские спектры и химическая связь*. Новосибирск: Наука, 1982
3. Л.Н.Мазалов, Рентгеноэлектронная спектроскопия и ее применение в химии, *Соросовский образовательный журнал, Химия*, 2000.
4. Бриггс Д., Сих М.П. *Анализ поверхности методами оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии*. Пер. с англ. — М.: Мир, 1987.
5. Я.В.Зубавичус, Ю.Л.Словохотов, Рентгеновское синхротронное излучение в физико-химических исследованиях, *Усп. химии*, 70 (2001), 429-463.

6. Лекции в pdf-формате

Дополнительная литература

1. X-ray Data Booklet <http://xdb.lbl.gov>
 2. Д.И. Кочубей, В.В. Канажевский В.В. EXAFS И XANES СПЕКТРОСКОПИЯ
http://ssrc.inp.nsk.su/СКР/lectures/EXAFS_and_XANES_spectroscopy.pdf
 3. Zh. Ren, et al., J. Synchrotron Rad. (1999). 6, 891
 4. R.W. Strange, M. Ellis, S.S. Hasnain, Atomic resolution crystallography and XAFS, *Coord. Chem. Rev.* 249 (2005) 197
 5. А.В. Финкельштейн, О.В. Птицын, Физика белка. М.: «Университет», 2005.
11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели: Словохотов Юрий Леонидович, д.х.н., проф., yurislovo@yandex.ru

13. Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1. 2.

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.

• Образцы контрольных вопросов к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Выработка СИ в синхротронных центрах. Источники СИ 1, 2 и 3 поколения
2. Взаимодействие рентгеновского СИ с веществом. Рентгеновская оптика, брегговские монохроматоры
3. Полоса рентгеновского поглощения и содержащаяся в ней информация.
4. Рентгеноэмиссионные линии: характеристическое излучение рентгеновской трубки и элементный спектр в рентгенофлуоресцентной спектроскопии.
5. Принципы рентгенофотоэлектронной спектроскопии и реализация РФЭС на СИ.

6. XAFS-спектры поглощения и рентгеновской флуоресценции. Околлокраевая область XANES Основная формула EXAFS
7. Структурная информация, получаемая методом EXAFS.
8. Формула Дебая и функция радиального распределения атомов.
9. Основные принципы малоуглового рентгеновского рассеяния. Комбинированная методика SAXS-WAXS.
10. Использование СИ в порошковой и монокристалльной рентгеновской дифракции.
11. Аномальное рассеяние СИ и его использование в рентгеновской кристаллографии белков

Приложение 1. Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Методы колебательной спектроскопии для исследования функциональных материалов» на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	1	2	3	4	5	
З1 (УК-1) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач с применением синхротронного излучения	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области рентгеновского СИ	Общие, но не структурированные знания в области рентгеновского СИ и методов на его основе	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания рентгеновских методов на СИ	Сформированные систематические знания выработки рентгеновского СИ, его свойств и методов на основе	зачет в письменной форме
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности основные дифракционные и спектроскопические рентгеновские методы на СИ	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе и применении основных рентгеновских методов	В целом успешно, но не систематически осуществляемое умение в выборе и применении основных методов исследования вещества с использованием рентгеновского СИ	В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы умения в выборе и применении основных методов исследования вещества с использованием рентгеновского СИ	Сформированное умение в выборе и применении основных методов дифракционного и спектроскопического исследования вещества с использованием рентгеновского СИ	решение предложенных задач
З1 (ПК-1, ПК-16) Знать особенности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о	Неполные представления о	Сформированные, но содержащие	Сформированное систематические	зачет в письменной форме

спектроскопических и дифракционных рентгеновских методов на основе СИ		рентгеновских методах на основе СИ	дифракционных и спектроскопических рентгеновских методах на основе СИ	отдельные пробелы представления о дифракционных и спектроскопических рентгеновских методах на основе СИ	представления о дифракционных и спектроскопических рентгеновских методах на основе СИ	
У1 (ПК-1, ПК-16) Уметь использовать данные основных спектроскопических и дифракционных методов на основе рентгеновского СИ	Отсутствие умений	Интуитивный и не всегда верный выбор методов, фрагментарный анализ их данных превращений	Допускает отдельные ошибки при выборе рентгеновских методов на СИ и анализе их данных	Выбирает правильные методы исследования вещества на основе рентгеновского СИ без адекватного обоснования выбора	Умеет правильно выбрать и обосновывать методы исследования вещества на основе рентгеновского СИ	решение предложенных задач
В1 (ПК-1, ПК-16) Владеть методами оценки достоверности информации, предоставляемой рентгеновскими методами исследования вещества на основе СИ	Отсутствие оценки и знания методов	Знание основ рентгеновских методов при отсутствии знаний о предоставляемой ими информации	Аргументированный выбор рентгеновских методов и анализ достоверности их данных без знания специфики СИ	Аргументированный выбор рентгеновских методов и анализ достоверности их данных со знанием специфики СИ без уверенного применения знаний к конкретным структурно-химическим задачам	Грамотный и аргументированный выбор рентгеновских методов на СИ и анализ достоверности их данных, уверенное применение знаний к конкретным структурно-химическим задачам	решение предложенных задач, зачет в письменной форме