

*Приложение к приказу первого проректора  
по учебной и научной работе*

от \_\_\_\_\_ № \_\_\_\_\_

**Правительство Российской Федерации  
Санкт-Петербургский государственный университет**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

*Локальная структура вещества и рентгеновская спектроскопия поглощения  
Local structure and x-ray absorption spectroscopy*

**Язык(и) обучения**

русский

Трудоёмкость (границы трудоёмкости) в зачетных единицах: 2

Регистрационный номер рабочей программы: \_\_\_\_\_

Санкт-Петербург

2016

## Раздел 1. Характеристики учебных занятий

### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

Курс рассчитан на студентов, обучающихся в магистратуре, и нацелен на формирование у студентов общих представлений о локальной атомной, электронной и магнитной структуре материалов и рентгеноспектральных методиках их исследования. В курсе рассматриваются особенности экспериментальной техники и теоретического описания рентгеноспектральных методик для исследования локальной атомной, электронной и магнитной структурам материалов. Студенты научатся определять параметры локальной атомной, электронной и магнитной структур материалов на основе рентгеноспектральных методик с использованием современного программного обеспечения и смогут использовать полученные навыки для подготовки магистерской диссертации и в последующей профессиональной деятельности.

### 1.2. Требования к подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)

Для успешного освоения программы дисциплины «Локальная структура вещества и рентгеновская спектроскопия» студентам необходимо прослушать курсы лекций «Теория взаимодействия синхротронного (рентгеновского) и нейтронного излучения с веществом», «Симметрия, структура и свойства твердых тел – кристаллография и кристаллофизика» и «Источники нейтронов и рентгеновского излучения»

### 1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать основные понятия и характеристики локальной атомной, электронной и магнитной структуры материалов;
- знать рентгеноспектральные методики исследования локальной атомной, электронной и магнитной структуры материалов;
- уметь разрабатывать идеологию эксперимента на современном рентгеноспектральном оборудовании в том числе с использованием источников синхротронного излучения;
- иметь навыки анализа полученных экспериментальных данных с использованием компьютерных программ PyMca, Viper.
- иметь навыки теоретического моделирования рентгеновских спектров с использованием компьютерных программ (на примере кода FEFF).

### 1.4. Перечень активных и интерактивных форм учебных занятий

- Семинар – изложение содержания сопровождается презентацией (демонстрацией учебных материалов, представленных в различных знаковых системах, в т.ч. иллюстративных, графических, аудио- и видеоматериалов) (30 часов).
- Самостоятельная работа в присутствии преподавателя (15 часов).

## Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

### 2.1. Организация учебных занятий

#### 2.1.1 Основной курс

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся				
Период обучения (модуль)	Контактная работа обучающихся с преподавателем	Самостоятельная работа	Всего занятий	Трудоёмкость

		лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам.раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)	итоговая аттестация (сам.раб.)		
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																			
<b>очная форма обучения</b>																			
Семестр 2		30	2							2			15	21		4		49	2
		2-10	2-10						2-10			2-10	2-10		2-10				
<b>ИТОГО</b>		<b>30</b>	<b>2</b>						<b>2</b>			<b>15</b>	<b>21</b>		<b>4</b>			<b>49</b>	<b>2</b>

Формы текущего контроля успеваемости, виды промежуточной и итоговой аттестации			
Период обучения (модуль)	Формы текущего контроля успеваемости	Виды промежуточной аттестации	Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>			
<b>очная форма обучения</b>			
Семестр 2		зачет	

## 2.2. Структура и содержание учебных занятий

**Основной курс    Основная траектория    Очная форма обучения**

Период обучения (модуль): **Семестр 2**

№ п/п	Наименование темы (раздела, части)	Вид учебных занятий	Количество часов
	2.1 Теоретические основы исследования дальней тонкой структуры рентгеновского поглощения 2.1.1 Основные физические принципы описания процесса поглощения рентгеновского кванта в веществе. 2.1.2 Обоснование приближения однократного рассеяния фотоэлектрона. 2.1.3 Теоретические методики получения структурной информации из спектров дальней тонкой структуры	Семинары	10

	<p>рентгеновского поглощения.</p> <p>2.2 Практика EXAFS спектроскопии.</p> <p>2.2.1. Техника эксперимента: Особенности экспериментальных установок для получения спектров рентгеновского поглощения. Современные экспериментальные методики и перспективы их развития на ближайшее будущее.</p> <p>2.2.3 Выделение интерференционной функции, Проблема E0, Выделение структурных данных, корреляции параметров.</p> <p>2.2.4. Возможности и ограничения метода EXAFS спектроскопии.</p> <p>2.3 Спектроскопия рентгеновского поглощения в ближней области.</p> <p>2.3.1. Физические основы формирования ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения.</p> <p>2.3.2. Влияние процессов многократного рассеяния фотоэлектрона на формирование XANES</p> <p>2.3.3. Химический сдвиг рентгеновских спектров поглощения</p> <p>2.3.4. Теоретические основы интерпретации и моделирования спектров рентгеновского поглощения.</p> <p>2.3.5. Интерпретация XANES в рамках одноэлектронного приближения и многоэлектронные эффекты</p> <p>2.3.6. Учет поля остовой дырки</p> <p>2.3.7. Поляризация зависимость спектров поглощения</p> <p>2.3.8. Зависимость структуры XANES от размеров атомного кластера</p> <p>2.3.9. Влияние отклонения потенциала от маффин-тин формы</p>		
1	<p>3.1. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с «металлическим» типом химической связи.</p> <p>3.2. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с ионным типом химической связи.</p> <p>3.3. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с ковалентным типом</p>	Семинары	10

<p>химической связи.</p> <p>3.4 Исследование локальной атомной и электронной структуры металлопротеинов.</p> <p>3.5. Исследование локальной атомной и электронной структуры медицинских препаратов.</p> <p>3.6. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанотрубок.</p> <p>3.7. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанополупроводников.</p> <p>3.8. Исследование локальной атомной и электронной структуры наноструктурированных материалов водородной энергетик.</p> <p>3.9 Исследование локальной атомной и электронной структуры нанокатализаторов.</p> <p>3.10. Спектроскопия XMCD</p> <p>3.11 Спектроскопия с фемтосекундным разрешением по времени.</p> <p>3.12 Спектроскопия с пространственным разрешением (micro-nano-XANES).</p>		
<p>1.1 Рентгеновские эмиссионные спектры молекул</p> <p>1.1.1. Энергия линий и их интенсивность в приближении МО ЛКАО</p> <p>1.1.2. Интерпретация рентгеновских K- и L спектров хлора в молекуле HCl</p> <p>1.2 Форма рентгеновских полос макроскопических частиц</p> <p>1.2.1 Распределение Ферми для валентных электронов и ширина полос</p> <p>1.2.2. Теория формы рентгеновских полос</p> <p>1.2.3. Влияние температуры на форму рентгеновских полос</p> <p>1.2.4. Зависимость формы рентгеновских эмиссионных линий и полос от электронной структуры вещества</p> <p>1.2.5 Зависимость энергетическое положение максимумов рентгеновского эмиссионного спектра от электронной структуры вещества.</p> <p>1.2.6. Сателлиты рентгеновских</p>	Семинары	10

<p>спектров. Систематика спутников рентгеновских спектров. Природа низкоэнергетических спутниковых линий. Оже- эффект. Природа высокоэнергетических спутниковых линий. Явление многократной ионизации.</p> <p>1.3 Теоретические основы интерпретации и моделирования спектров рентгеновской эмиссии.</p>		
<p>1. Определение зарядового состояния атомов в материале на основе анализа химического сдвига края рентгеновского поглощения.</p> <p>2. Определение наноразмерной атомной структуры платиновых противораковых препаратов разных поколений.</p> <p>3. Расчет зависимости тонкой структуры спектра XANES нанокластеров меди в зависимости от размера нанокластера.</p>	<p>Самостоятельная работа в присутствии преподавателя</p>	<p>15</p>

### Раздел 3. Обеспечение учебных занятий

#### 3.1. Методическое обеспечение

##### 3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины

Для освоения дисциплины студенту предоставляется адаптированная программа курса, содержащая разделы 2, 3.1 и 3.4 данной Рабочей программы, а также электронная презентация всех лекций в формате PPT или PDF. Кроме того для лучшего закрепления материала проводится три письменных опроса по каждому разделу курса.

Письменный опрос проходит по следующей схеме: студентам последовательно зачитываются шесть тем, содержащие по пять вопросов с возрастающей сложностью, за правильный ответ на первый вопрос начисляется 10 очков, на второй – 20, на третий – 30, на четвёртый 40, на пятый – 50. При отсутствии ответа начисляется 0 очков, за неправильный ответ соответствующее число очков вычитается. Максимальное количество очков за один опрос – 900, за все три опроса – 2700. 90 очков приравниваются к 1 баллу.

На обдумывание одного вопроса и запись ответа отводится 3 минуты.

##### 3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы

Для самостоятельной работы студенты должны обеспечиваться:

- перечнем заданий для самостоятельной работы;
- методическими указаниями для использования программных продуктов PyMca, Viper и FEFX при выполнении заданий.

##### 3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Проведение промежуточной аттестации будет осуществляться в виде устного экзамена и оцениваться на основании Балльно-рейтинговой системы. Целями введения балльно-

рейтинговой системы являются стимулирование систематической учебной работы студентов в течение всего периода обучения, повышение объективности оценки знаний студентов и мотивация их к систематической самостоятельной работе по изучению дисциплины в течение семестра.

Общее максимальное количество баллов – 100, из которых за письменные опросы – 30 баллов, за самостоятельную работу, выполняемую в присутствии преподавателя – 30 баллов, за ответ на вопросы во время промежуточной аттестации – 40 баллов.

Экзаменационный билет содержит два вопроса, на каждый из которых студент должен привести развернутый конспект с планом ответа, необходимыми определениями, иллюстрациями, формулами и зависимостями. Для подготовки к ответу по билету дается не более 1 часа. Затем, в устной форме студент, пользуясь конспектом, должен связно и исчерпывающе изложить содержание ответа.

В ходе ответа преподавателем могут быть заданы студенту уточняющие вопросы по билету. На обдумывание ответа на дополнительные вопросы студенту дается не более 10 минут на каждый ответ. В общей сложности ответ студента не должен превышать 40 минут без учета времени на обдумывание дополнительных вопросов.

3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)

### **Типовая тема при проведении письменного опроса**

ТЕМА: Обработка экспериментальных данных

10 очков: Какую особенность представляет собой точка на спектре поглощения, выбираемая в качестве энергии ионизации  $E_0$ ?

20 очков: На какую величину (приблизительно), и в какую сторону сдвигается край поглощения при изменении степени окисления поглощающего атома на +1?

30 очков: Какие параметры локальной структуры характеризуют интенсивность, положение и ширина пиков Фурье-трансформанты нормализованной функции поглощения?

40 очков: Укажите три основные проблемы при проведении съемки спектров поглощения по выходу флюоресценции.

50 очков: Напишите выражение для максимального числа варьируемых параметров при подгонке экспериментального EXAFS-спектра в зависимости от диапазонов полезных данных.

### **Перечень билетов для проведения промежуточной аттестации студентов.**

Билет 1.

1. Теоретические основы исследования дальней тонкой структуры рентгеновского поглощения .
2. Исследования локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с «металлическим» типом химической связи..

Билет 2.

1. Особенности экспериментальных установок для получения спектров рентгеновского поглощения. Современные экспериментальные методики и перспективы их развития на ближайшее будущее..

2. Исследования локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с ковалентным типом химической связи.

Билет 3.

1. Возможности и ограничения метода EXAFS спектроскопии.

2. Исследования локальной атомной и электронной структуры нанокластеров с ионным типом химической связи.

Билет 4.

1. Физические основы формирования ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения. Влияние процессов многократного рассеяния фотоэлектрона на формирование XANES

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры металлопротеинов.

Билет 5.

1. Интерпретация XANES в рамках одноэлектронного приближения и многоэлектронные эффекты.

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры медицинских препаратов.

Билет 6.

1. Зависимость формы рентгеновских эмиссионных линий и полос от электронной структуры вещества

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанотрубок

Билет 7.

1. Рентгеновские эмиссионные спектры молекул. Энергия линий и их интенсивность в приближении МО ЛКАО

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанотрубок.

Билет 8.

1. Спектроскопия с пространственным разрешением (micro-nano-XANES).

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры наноигол разбавленных магнитных полупроводников.

Билет 9.

1. Спектроскопия XMCD

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры наноструктурированных материалов водородной энергетик.

Билет 10.

1. Спектроскопия с фемтосекундным разрешением по времени.

2. Исследование локальной атомной и электронной структуры нанокатализаторов

3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

**Анкета-отзыв** на дисциплину «Локальная структура вещества и рентгеновская спектроскопия»

Просим Вас заполнить анкету-отзыв по прочитанной дисциплине. Обобщенные данные анкет будут использованы для ее совершенствования. По каждому вопросу проставьте соответствующие оценки по шкале от 1 до 10 баллов (**обведите** выбранный Вами балл). В случае необходимости впишите свои комментарии.

1. Насколько Вы удовлетворены содержанием дисциплины в целом?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий \_\_\_\_\_

2. Насколько Вы удовлетворены общим стилем преподавания?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий \_\_\_\_\_

3. Как Вы оцениваете качество подготовки предложенных методических материалов?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий \_\_\_\_\_

4. Какой из модулей (разделов) дисциплины Вы считаете наиболее полезным, ценным с точки зрения дальнейшего обучения и/или применения в последующей практической деятельности?

Комментарий \_\_\_\_\_

5. Что бы Вы предложили изменить в методическом и содержательном плане для совершенствования преподавания данной дисциплины?

Комментарий \_\_\_\_\_

СПАСИБО!

### **3.2. Кадровое обеспечение**

3.2.1 Образование и (или) квалификация преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий

К чтению лекций должны привлекаться преподаватели, имеющие ученую степень и/или ученое звание, имеющие опыт планирования и организации учебного процесса, а также главные и ведущие специалисты в этой области.

3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Требования не предъявляются

### **3.3. Материально-техническое обеспечение**

3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий

Стандартно оборудованные лекционные аудитории для проведения интерактивных лекций: видеопроектор, экран настенный, компьютер с выходом в интернет.

3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования

Для проведения занятия необходимы: видеопроектор, ноутбук, переносной экран. В компьютерном классе должны быть установлены средства MS Office 2007-2013: Word, Excel, PowerPoint и др. (допустима версия MS Office 2003) с установленным плагином для проигрывания файлов Adobe Flash.

### 3.3.3 Характеристики специализированного оборудования

Рабочие места преподавателя и студентов должны быть оснащены оборудованием не ниже: Pentium III-800/ОЗУ-256 Мб / Video-32 Мб / Sound card – 16bit /Headphones / HDD 80 Гб / CD-ROM – 48x / Network adapter – 10/100/ Мбс / SVGA – 19”

### 3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения

Каждый обучающийся во время занятий и самостоятельной подготовки должен быть обеспечен рабочим местом в компьютерном классе с выходом в Интернет и корпоративную сеть факультета. Компьютерный класс должны быть обеспечен комплектом программного обеспечения PyMca, Viper, FEF, Origin.

### 3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов

Фломастеры цветные, губки, бумага формата А4, канцелярские товары, картриджи принтеров, диски, флеш-накопители и др. в объёме, необходимом для организации и проведения занятий, по заявкам преподавателей, подаваемым в установленные сроки.

## 3.4. Информационное обеспечение

### 3.4.1 Список обязательной литературы

1. D. McMorrow, J. Als-Nielsen, Elements of Modern X-ray Physics (2nd Edition), John Wiley & Sons, 2011
2. В.Л. Мазалова, А.Н. Кравцова, А.В. Солдатов. Нанокластеры: рентгеноспектральные исследования и компьютерное моделирование. Москва: Физ-Мат. Лит., 2012.
3. P. van der Heide, X-Ray Photoelectron Spectroscopy : An Introduction to Principles and Practices, John Wiley & Sons, 2011

### 3.4.2 Список дополнительной литературы

1. Солдатов А.В. От спектроскопии EXAFS к спектроскопии XANES: новые возможности исследования материи // Соросовский образовательный журнал, 1998, №12, С.101-104.
2. А.В. Солдатов, Ближняя область рентгеновского поглощения как источник структурной информации, Журнал структурной химии 49 (2008) s111-s115.
3. G. Bunker, Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, Cambridge Univ. Press, 2010.
4. Jinqhua Guo, X-Rays in Nanoscience: Spectroscopy, Spectromicroscopy, and Scattering Techniques, Wiley, 2010.
- 3.4.3 Перечень иных информационных источников
5. М.А.Зыкин, Я.В.Зубавичус, EXAFS- и XANES-спектроскопия. Методическая разработка, МГУ, Москва, 2011
6. Enikoe Seres and Christian Spielmann (2011). Time Resolved Spectroscopy with Femtosecond X-Ray Pulses, Femtosecond-Scale Optics, Prof. Anatoly Andreev (Ed.), ISBN: 978-953-307-769-7, InTech.
7. А.Л. Бугаев, А.А. Гуда, В.П. Дмитриев, К.А. Ломаченко, И.А. Панкин, Н.Ю. Смоленцев, М.А. Солдатов, А.В. Солдатов, Динамика наноразмерной атомной и электронной структуры материалов водородной энергетики при реалистичных технологических условиях, Инженерный вестник Дона, 4 (ч. 1), 2012 г.
8. Kyle M. Lancaster et al., X-ray Emission Spectroscopy Evidences a Central Carbon in the Nitrogenase Iron-Molybdenum Cofactor, Science 334, 974 (2011)

9. И.Я.Никифоров. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Ростов-на-Дону, ДГТУ 2011.
10. Солдатов А.В., Зубавичус Я.В.. Учебное пособие “Рентгеновская спектроскопия (спектроскопия EXAFS)” часть 1, ЮФУ 2012.
11. Солдатов А.В. Учебное пособие “Рентгеновская спектроскопия (спектроскопия XANES)”, ЮФУ 2012.
12. Солдатов А.В. Мазалов Л.Н., Курмаев Э.З., Учебное пособие “Рентгеновская эмиссионная спектроскопия” часть 1, ЮФУ 2012.
13. Солдатов А.В. Мазалов Л.Н., Курмаев Э.З., Учебное пособие “Рентгеновская эмиссионная спектроскопия” часть 2, ЮФУ 2012.
14. Фетисов Г. В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. — М.: Физматлит, 2007. — 672 с.

### 3.4.3 Перечень иных информационных источников

#### Раздел 4. Разработчики программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Мистонов Александр Андреевич	к.ф.м.н.	-	Старший преподаватель	<a href="mailto:a.mistonov@spbu.ru">a.mistonov@spbu.ru</a> +7-921-5692432