

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
общей и неорганической химии
(наименование кафедры, отвечающей за реализацию дисциплины)
проф. Семенов В. Н.
(подпись, расшифровка подписи)
30.06.2021г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.04.01 Структурный анализ и дифракционные методы исследования

(код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом)

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** Теоретическая и экспериментальная химия
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** общей и неорганической химии
- 6. Составители программы:** Наумов Александр Владимирович, к. х. н.
(ФИО, ученая степень, ученое звание)
- 7. Рекомендована:** Научно-методическим советом химического факультета 17.06.2021,
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)
протокол № 5
(отметки о продлении, вносятся вручную)
- 8. Учебный год:** 2024/2025 **Семестр(ы):** 7

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целями освоения учебной дисциплины являются:

изучение методов структурного анализа в химии твердого тела.

Задачи учебной дисциплины:

- изучение основ теории дифракции на кристаллических решетках;
- изучение экспериментальных основ рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

часть, формируемая участниками образовательных отношений (вариативная) блока Б1, дисциплины по выбору.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ-1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.	ПКВ-1.1	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач	Знать: как обеспечить сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач; Уметь: обеспечивать сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач; Владеть: обеспечением сбора научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач.
		ПКВ-1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	Знать: как составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта; Уметь: составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта; Владеть: составлением аналитического обзора собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта.
ПКВ-2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПКВ-2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: как составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий; Уметь: составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий; Владеть: составлением общего плана исследования и детальных планов отдельных стадий.

		ПКВ-2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	<p>Знать: как выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p>Уметь: выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p>Владеть: выбором экспериментальных и расчетно-теоретических методов решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.</p>
ПКВ-3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПКВ-3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	<p>Знать: как систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными;</p> <p>Уметь: систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными;</p> <p>Владеть: систематизацией информации, полученной в ходе НИР и НИОКР, анализом ее и сопоставлением с литературными данными.</p>
		ПКВ-3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	<p>Знать: как определять возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;</p> <p>Уметь: определять возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;</p> <p>Владеть: определением возможных направлений развития работ и перспектив практического применения полученных результатов.</p>

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час (в соответствии с учебным планом) –
3 / 108

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			7 семестр	__ семестр
Аудиторные занятия		90	90	
в том числе	лекции	36	36	
	практические			
	лабораторные	54	54	
Самостоятельная работа		18	18	
Форма промежуточной аттестации (экзамен – __ час)				
Итого:			108	

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Пространственная симметрия кристаллической решетки	Точечная (линейная ортогональная) и пространственная (аффинная) симметрия. Кристаллографические точечные группы. Строение пространственной группы, симморфные и несимморфные группы. Действие группы на линейном и аффинном пространстве, орбиты точек, позиции Уайкоффа. Обратная решетка.	–
1.2	Дифракция от кристаллов	Интерференция и дифракция волн. Условия Лауэ, условие Вульфа–Брэггов. Амплитуда рассеяния. Функция электронной плотности. Атомная амплитуда. Интенсивность отражений. Температурный фактор. Группы Лауэ. Условия погасания. «Рентгеновские» и «нерентгеновские» пространственные группы. Понятие о нейтронографии. Понятие об электронографии. Расшифровка кристаллических структур. Дифракция на монокристалле. Индицирование порошковой дифрактограммы. Определение кристаллографической системы и параметров решетки. Рассеяние на некристаллических веществах.	–
1.3	Техника рентгеноструктурного анализа	Получение и свойства рентгеновского излучения. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Метод порошка. Устройство дифрактометра, методы коллимации, монохроматизации и фокусировки. Метод Лауэ.	–
2. Практические занятия			
2.1			
3. Лабораторные занятия			
3.1	Пространственная симметрия кристаллической решетки	Строение пространственной группы. Точечная и пространственная симметрия решеток основных структурных типов. Построение орбит.	–
3.2	Дифракция от кристаллов	Индицирование порошковых дифрактограмм для кубической, тетрагональной и ромбической систем, вычисление параметров решетки. Индицирование дифрактограмм для гексагональной системы, вычисление параметров решетки. Понятие о профиле рефлекса, профилирование рефлексов. Метод Ритвельда. Рентгенофазовый анализ.	–
3.3	Техника рентгеноструктурного анализа	Обзор конфигураций современных рентгеновских дифрактометров. Особенности рентгеновской оптики.	–

* Заполняется, если отдельные разделы дисциплины изучаются с помощью онлайн-курса. В колонке Примечание необходимо указать название онлайн-курса или ЭУМК. В других случаях в ячейки ставятся прочерки.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоят. работа	Всего
1.1	Пространственная симметрия кристаллической решетки	14		20	6	40
1.2	Дифракция от кристаллов	16		24	6	46
1.3	Техника рентгеноструктурного анализа	6		10	6	22
Итого:		36		54	18	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Методические материалы, доступные в локальной сети Университета (сайт библиотеки), включают в себя следующие типы материалов: учебники, учебные пособия, методические указания для студентов, в которых изучаемый материал представлен в систематизированном и структурированном виде, и которые включают в себя необходимые таблицы, схемы и материалы презентаций, с опорой на которые проводится аудиторная работа. Также в локальной сети размещены методические указания для преподавателя и указания для самопроверки. На протяжении курса студенты по инициативе лектора обсуждают в аудитории наиболее сложные вопросы и детали курса.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

(список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Современная кристаллография / Б. К. Вайнштейн (гл. ред.). – В 4-х тт. – М. : Наука, 1979.
2	Липсон Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм / Г. Липсон, Г. Стипл. – М. : Мир, 1972.
3	Бокий Г. Б. Рентгеноструктурный анализ / Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. – В 2-х тт. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 1964.
4	Чупрунов Е. В. Основы кристаллографии / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. – М. : Изд-во Физ.-мат. лит., 2006.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
5	Бокий Г. Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – М. : Наука, 1971.
6	Ормонт Б. Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников / Б. Ф. Ормонт. – М. : Высш. шк., 1973.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет) *

№ п/п	Источник
7	lib.vsu.ru
8	http://www.elibrary.ru – Научная электронная библиотека
9	http://www.en.edu.ru – Естественнонаучный образовательный портал

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договоры у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы, онлайн-курсы, ЭУМК.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

(учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Пункты 1 – 4 а), пункты 5 – 6 б)

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение:

При реализации дисциплины проводятся лекции (вводная и по разделам дисциплины), семинарские занятия (проблемные, дискуссионные и т. д.), проводится текущая аттестация, самостоятельная работа по дисциплине или отдельным ее разделам и т. д.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

(при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)

Мультимедийное оборудование для чтения лекций с использованием электронных презентаций.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1	Пространственная симметрия кристаллической решетки	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
2	Дифракция от кристаллов	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
3	Техника рентгеноструктурного анализа	ПКВ-1 ПКВ-2 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Практикоориентированные задания / домашние задания
Промежуточная аттестация форма контроля – <i>зачет</i>				Перечень вопросов

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Практикоориентированные задания / домашние задания

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень заданий, тем рефератов, тем презентаций, курсовых, докладов, лабораторных работ
требования к представлению портфолио

Формулируются вариативно исходя из разделов дисциплины

Описание технологии проведения

Устный опрос

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на зачетный вопрос, с доказательством теорем, выводом уравнений и т.п. и умение иллюстрировать эти факты примерами. Ответ соответствует перечисленным показателям

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень заданий, тем рефератов, тем презентаций, курсовых, докладов, требования к представлению портфолио, вопросов к экзамену (зачету) и порядок формирования КИМ

1. Точечная (линейная ортогональная). Кристаллографические точечные группы.
 2. Пространственная (аффинная) симметрия. Строение пространственной группы, симморфные и несимморфные группы.
 3. Действие группы на линейном и аффинном пространстве, орбиты точек, позиции Уайкоффа.
 4. Обратная решетка.
- Интерференция и дифракция волн. Условия Лауэ, условие Вульфа–Брэггов.
5. Амплитуда рассеяния. Функция электронной плотности. Атомная амплитуда. Интенсивность отражений.
 6. Температурный фактор.
 7. Группы Лауэ.
 8. Условия погасания. «Рентгеновские» и «нерентгеновские» пространственные группы.
 9. Понятие о нейтронографии.
 10. Понятие об электронографии.
 11. Индексирование порошковой дифрактограммы. Определение кристаллографической системы и параметров решетки.
 12. Индексирование порошковых дифрактограмм для кубической, тетрагональной и ромбической систем, вычисление параметров решетки.
 13. Индексирование дифрактограмм для гексагональной системы, вычисление параметров решетки.
 14. Рассеяние на некристаллических веществах.
- Понятие о профиле рефлекса, профилирование рефлексов.
15. Метод Ритвельда.
 16. Рентгенофазовый анализ.
 17. Получение и свойства рентгеновского излучения. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом.
 18. Метод порошка.
 19. Устройство порошкового дифрактометра, методы коллимации, монохроматизации и фокусировки.
 20. Метод Лауэ.

Описание технологии проведения
Устный опрос

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Знание основных фактов, совокупность которых дает ответ на зачетный вопрос, с доказательством теорем, выводом уравнений и т.п. и умение иллюстрировать эти факты примерами. Ответ соответствует перечисленным показателям