

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)  
10.04.2025 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.В.11 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: 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 10.03.2025,  
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)  
протокол № 10-03
8. Учебный год: 2028/202 Семестр(ы)/Триместр(ы): 8

## 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	<b>Знать:</b> как обеспечить сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач;  <b>Уметь:</b> обеспечивать сбор научной, технической и патентной информации для решения исследовательских задач;  <b>Владеть:</b> 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	<b>Знать:</b> как составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта;  <b>Уметь:</b> составлять аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта;  <b>Владеть:</b> 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	<b>Знать:</b> как составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий;  <b>Уметь:</b> составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий;  <b>Владеть:</b> 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><b>Знать:</b> как выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p><b>Уметь:</b> выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;</p> <p><b>Владеть:</b> 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><b>Знать:</b> как систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными;</p> <p><b>Уметь:</b> систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными;</p> <p><b>Владеть:</b> 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><b>Знать:</b> как определять возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;</p> <p><b>Уметь:</b> определять возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;</p> <p><b>Владеть:</b> 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	№ семестра
Аудиторные занятия		90	90	
в том числе	лекции	36	36	
	практические	36	36	
	лабораторные			
Самостоятельная работа		36	36	
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 *
<b>1. Лекции</b>			
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.	—
<b>2. Практические занятия</b>			
2.1			
<b>3. Лабораторные занятия</b>			
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	14		12	40
1.2	Дифракция от кристаллов	16	18		12	46
1.3	Техника рентгеноструктурного анализа	6	4		12	22
Итого:		36	36		36	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	<b>Современная</b> кристаллография / Б. К. Вайнштейн (гл. ред.). – В 4-х тт. – М. : Наука, 1979.
2	<b>Липсон Г.</b> Интерпретация порошковых рентгенограмм / Г. Липсон, Г. Стипл. – М. : Мир, 1972.
3	<b>Бокий Г. Б.</b> Рентгеноструктурный анализ / Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. – В 2-х тт. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 1964.
4	<b>Чупрунов Е. В.</b> Основы кристаллографии / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. – М. : Изд-во Физ.-мат. лит., 2006.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	<b>Бокий Г. Б.</b> Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – М. : Наука, 1971.
2	<b>Ормонт Б. Ф.</b> 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
1	lib.vsu.ru – Университетская библиотека online
2	Информационно-телекоммуникационная система «Контекстум» (Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ»)
3	<a href="http://www.elibrary.ru">http://www.elibrary.ru</a> – Научная электронная библиотека
4	<a href="http://www.en.edu.ru">http://www.en.edu.ru</a> – 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

## 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:

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