

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 01.06.2023 11:54:28  
Уникальный программный ключ:  
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса  
Лумумбы»**

**Факультет физико-математических и естественных наук**  
(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«Рентгенодифракционные методы в неорганической химии»**  
(наименование дисциплины/модуля)

**Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:**

**04.04.01 «Химия»**  
(код и наименование направления подготовки/специальности)

**Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):**

**«Фундаментальная и прикладная химия»**  
(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

**2023 г.**

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» является формирование научного мировоззрения, теоретической и практической подготовки современных специалистов, имеющих навыки определения кристаллической структуры и установления связи строения и свойств веществ с возможностью их практического применения.

## 2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

*Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)*

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных
		М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)
М-ПК-3-н	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-3-н-2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов

## 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» относится к элективной части блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования Научно-исследовательская работа Экспериментальные методы исследования в химии	Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
М-ПК-3-н	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования Научно-исследовательская работа Экспериментальные методы исследования в химии	Физико-химический анализ Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» составляет 3 зачетных единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		1	2	3	4
Контактная работа, ак.ч.	54		54		
в том числе:					

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		1	2	3	4
Лекции (ЛК)	36		36		
Лабораторные работы (ЛР)	18		18		
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	36		36		
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	18		18		
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	ак.ч. <b>108</b>		<b>108</b>		

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
Раздел 1. Природа рентгеновской дифракции	Тема 1.1. Природа рентгеновского излучения. Принципы работы рентгеновских аппаратов. Устройство рентгеновских трубок.	ЛК
	Тема 1.2. Рентгеновские спектры трубки, природа тормозного и характеристического спектра.	ЛК, ЛР
	Тема 1.3. Дифракция рентгеновских лучей атомным рядом из атомов одного и двух сортов. Дифракция трехмерной атомной решеткой. Условия Лауэ	ЛК, ЛР
	Тема 1.4. Дифракция как отражение. Уравнение Брэгга.	ЛК, ЛР
	Тема 1.5. Обратная решетка, взаимосвязь параметров прямой и обратной решетки. Сфера отражения. Векторная запись уравнения Брэгга.	ЛК, ЛР
Раздел 2. Методы получения дифракционного эффект	Тема 2.1. Метод порошка. Полихроматический метод. Метод вращения и качания.	ЛК
	Тема 2.2. Рентгенофазный анализ	ЛК, ЛР
	Тема 2.3. Схема и общие принципы работы 4-х круглых дифрактометров	ЛК, ЛР
	Тема 2.4. Новейшие методы получения и регистрации дифракционной картины	ЛК, ЛР
Раздел 3. Первый этап анализа структуры кристалла	Тема 3.1. Определение параметров ячейки по рентгенограммам. Число формульных единиц в элементарной ячейке	ЛК
	Тема 3.2. Симметрия в кристаллическом пространстве. Сингонии, точечные группы симметрии, пространственные группы симметрии. Решетки Бравэ	ЛК, ЛР
	Тема 3.3. Симметрия кристаллов и симметрия лауэграмм. Закон Фриделя. Лауэвские классы симметрии	ЛК, ЛР
Раздел 4. Второй этап анализа структуры кристалла	Тема 4.1. Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновской дифракции: поляризационный, температурный, кинематический,	ЛК

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	адсорбционный, экстинкционный, атомный. Понятие о первичной и вторичной экстинкции, термодиффузном рассеянии	
	Тема 4.2. Фактор атомного рассеяния рентгеновских лучей	ЛК, ЛР
	Тема 4.3. Понятие структурной амплитуды. Закон сложения когерентных волн	ЛК, ЛР
	Тема 4.4. Преобразование Фурье и представление электронной плотности рядом Фурье. Формула электронной плотности для centrosymmetric кристалла	ЛК, ЛР
	Тема 4.5. Проблема начальных фаз в рентгеноструктурном анализе. Необходимость опорных данных (координаты тяжелых атомов, начальные фазы сильных отражений). Общая схема последовательного выявления всех атомов	ЛК, ЛР
	Тема 4.6. Функция Паттерсона (межатомная функция), ее запись, интерпретация. Определение атомных координат по межатомной функции	ЛК, ЛР
	Тема 4.7. «Прямые» методы решения структур кристаллов (основные понятия). Особенности расшифровки centrosymmetric и неcentrosymmetric структур	ЛК, ЛР
	Тема 4.8. Метод тяжелого атома в решении структур кристаллов, виды Фурье – синтезов	ЛК, ЛР
	Тема 4.9. Уточнение атомных координат методом наименьших квадратов. Параметры, характеризующие точность определения координат. R – фактор	ЛК, ЛР
	Тема 4.10. Влияние температуры на рентгенодифракционную картину. Температурный фактор атома, формы его записи, тепловой эллипсоид. Уточнение параметров тепловых колебаний	ЛК, ЛР
	Тема 4.11. Общая схема основных этапов рентгеноструктурного анализа	ЛК, ЛР
Раздел 5. Решение структурных задач дифракционными методами	Тема 5.1. Аномальное рассеяние рентгеновских лучей и определение абсолютной конфигурации	ЛК
	Тема 5.2. Сравнительные возможности рентгеноструктурного, нейтронографического и электронографического методов в определении структуры молекул	ЛК, ЛР
	Тема 5.3. Полнопрофильный анализ. Метод Ритвельда	ЛК, ЛР
	Тема 5.4. Прецизионный рентгеноструктурный анализ, понятие о разностной и деформационной электронной плотности. Химическая связь в кристаллах	ЛК, ЛР

\* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – семинарские занятия.

## 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Набор решеток Браве и кристаллических решеток, Рентгеновский дифрактометр для поликристаллических исследований ДРОН-7, компьютеры
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами, доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Пакет программ для рентгендифракционных исследований (НПП «Буревестник»). Пакет программ для обработки спектров и расчета характеристик по рентгендифракционным данным, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН. Пакет программ для расчета кристаллохимических характеристик, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН.
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

*Основная литература:*

1. Методы исследования материалов и процессов [Текст] : Учебное пособие для вузов / В.Ю. Конюхов, И.А. Гоголадзе, З.В. Мурга. - 2-е изд., испр. и доп. - М. : Юрайт, 2018. - 226 с. - (Университеты России). - ISBN 978-5-534-05475-0 : 459.00.

<https://biblio-online.ru/viewer/metody-issledovaniya-materialov-i-processov-439014#page/1>

2. Анисович, А.Г. Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения : научное издание / Национальная академия наук Беларуси. - Минск : Беларуская навука, 2017. - 209 с. : ил. - Библиогр.: с.199-205 - ISBN 978-985-08-2112-6 ; То же [Электронный ресурс].

[http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=483969](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=483969)

3. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ : учебное пособие / Г.В. Фетисов ; ред. Л.А. Асланов. - Москва : Физматлит, 2007. - 673 с. - ISBN 978-5-9221-0805-8

[http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=76647](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=76647)

*Дополнительная литература:*

1. Лабораторный практикум по курсу "Рентгендифракционные методы в неорганической химии" [Текст] : Для студентов-химиков 5 курса / Н.Н. Лобанов, В.П. Полякова. - М. : Изд-во РУДН, 2007. - 118 с. : ил. - ISBN 978-5-209-02725-6 : 80.00.

2. Основы структурного анализа химических соединений [Текст] : Учебное пособие для химических специальностей университетов / М.А. Порай-Кошиц. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1989. - 192 с. : ил. - ISBN 5-06-000074-5 : 0.40.

3. Современные методы структурного анализа веществ : учебник / М.Ф. Куприянов, А.Г. Рудская, Н.Б. Кофанова и др. "Южный федеральный университет". - Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2009. - 288 с. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9275-0653-8

[http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=241003](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=241003)

*Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:*

1. ЭБС РУДН им. П. Лумумбы и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:

- Электронно-библиотечная система РУДН им. П. Лумумбы – ЭБС РУДН им. П. Лумумбы <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)

- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>

- ЭБС «Троицкий мост»

- Большая Научная Библиотека (<http://sci-lib.com/>)

- Каталог химических ресурсов на CHEMPORT.RU ([http://www.chemport.ru/catalog\\_tree.php](http://www.chemport.ru/catalog_tree.php))

- Список библиотек (доступ с ПК РУДН) (<http://www.rad.pfu.edu.ru/licenzirovannyye-resursy/tehnicheskie-i-estestvennye-nauki>)

- Электронная библиотека РФФИ (<http://www.elibrary.ru>)

- Совместный вычислительный проект № 14 для сбора лучших и наиболее часто используемых программ структурных исследований. Программное обеспечение, расположенное на сайте CCP14, доступно свободно для академических пользователей <http://www.ccp14.ac.uk>

- International Union of Crystallography <http://www.iucr.org>

2. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации <http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS <http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

*Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля\*:*

1. Курс лекций по дисциплине «Рентгendifракционные методы в неорганической химии».

2. Лабораторный практикум по дисциплине «Рентгendifракционные методы в неорганической химии».

3. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

\* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

## **8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система\* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Рентгendifракционные методы в неорганической химии» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

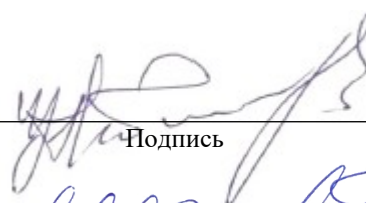
\* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН им. П. Лумумбы (положения/порядка).

### **РАЗРАБОТЧИКИ:**

**Доцент кафедры**

**неорганической химии**

\_\_\_\_\_  
Должность, БУП

  
\_\_\_\_\_  
Подпись

**Лобанов Н.Н.**

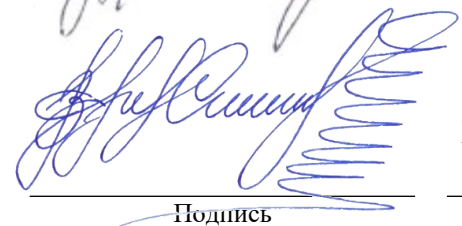
\_\_\_\_\_  
Фамилия И.О.

**РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:**

**Кафедра неорганической**

**химии**

\_\_\_\_\_  
Наименование БУП

  
\_\_\_\_\_  
Подпись

**Хрусталеv В.Н.**

\_\_\_\_\_  
Фамилия И.О.

**РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:**

**Декан ФФМиЕН,**

**заведующий кафедрой**

**органической химии**

\_\_\_\_\_  
Должность, БУП

  
\_\_\_\_\_  
Подпись

**Воскресенский Л.Г.**

\_\_\_\_\_  
Фамилия И.О.



