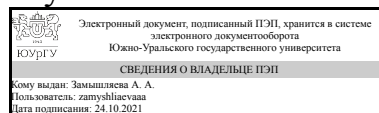


УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



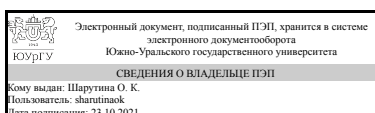
А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.П1.04 Рентгеноструктурный анализ
для направления 04.03.01 Химия
уровень Бакалавриат
профиль подготовки Химия
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

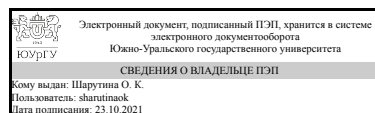
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

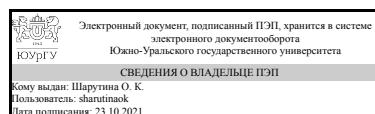
Разработчик программы,
д.хим.н., проф., заведующий
кафедрой



О. К. Шарутина

СОГЛАСОВАНО

Руководитель образовательной
программы
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

1. Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов представлений о физике, технике и возможностях рентгеноструктурного анализа, как одного из современных методов, широко применяемых в различных областях деятельности. Задачи освоения курса: 1. Ознакомить студентов с теоретическими основами рентгеноструктурного анализа, ограничениями метода, разновидностями и областями его применения. 2. Привить навыки практического использования результатов рентгеноструктурного анализа для решения фундаментальных и аналитических задач.

Краткое содержание дисциплины

Введение. Дифракционные методы исследования вещества. Рентгеновские методы. Получение, характеристика и свойства рентгеновского излучения. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Кинематическая теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах. Уравнение Вульфа-Брегга. Методы наблюдения дифракции рентгеновских лучей: метод вращения-качания, метод Лауэ, метод порошка (Дебая-Шерера). Порошковая рентгенография. Монокристалльная рентгенография. Этапы рентгеноструктурного анализа. Определение атомной структуры кристалла. Построение молекулярной структуры по данным монокристалльной рентгенографии. Монокристалльные дифрактометры. Специализированные программные комплексы для расшифровки структур. Структурные базы данных.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-3 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских и технологических задач химической направленности	Знает: физические основы метода рентгеноструктурного анализа, возможности и ограничения метода, требования, предъявляемые к объектам исследования, принципы работы дифрактометров Умеет: применять теоретические знания при оценке возможности использования рентгеноструктурного анализа для исследования конкретных объектов Имеет практический опыт: использования компьютерных программ для расшифровки и уточнения данных рентгеноструктурных исследований, визуализации полученных структур и их описания
ПК-5 Способен проектировать и осуществлять направленный синтез химических соединений и использовать современные экспериментальные методы для установления их структуры и свойств	Знает: основы физики рентгеновских лучей, взаимодействия рентгеновских лучей с веществом, практическое использование явления дифракции рентгеновских лучей в науке и технике Умеет: применять физические методы исследования, основанные на явлении дифракции, в профессиональной деятельности

	Имеет практический опыт: интерпретации результатов экспериментальных исследований, проведенных методами рентгеноструктурного анализа
--	--

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Физические методы исследования	Не предусмотрены

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Физические методы исследования	Знать: физические основы методов исследования, основанные на дифракции рентгеновских лучей.

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 ч., 46,25 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		8
Общая трудоёмкость дисциплины	72	72
<i>Аудиторные занятия:</i>	42	42
Лекции (Л)	14	14
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	14	14
Лабораторные работы (ЛР)	14	14
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	25,75	25,75
с применением дистанционных образовательных технологий	0	
Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по лабораторным работам.	6	6
Решение задач, подготовка к контрольной работе	6	6
Самостоятельное изучение программ, находящихся в открытом доступе, необходимых для расшифровки экспериментальных данных и визуализации структур	7,75	7.75
Подготовка к зачету	6	6
Консультации и промежуточная аттестация	4,25	4,25
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Введение. Историческая справка. Физика рентгеновского излучения	4	2	2	0
2	Кинематическая теория рассеяния лучей в кристаллах	6	2	4	0
3	Методы наблюдения дифракции рентгеновских лучей	2	2	0	0
4	Рентгенофазовый анализ	8	4	4	0
5	Рентгеноструктурный анализ монокристаллов	22	4	4	14

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Введение. Дифракционные методы исследования. История открытия рентгеновского излучения и его свойства.	2
2	2	Рассеяние рентгеновских лучей в кристалле. Дифракция рентгеновских лучей. Основное уравнение дифракции рентгеновских лучей.	2
3	3	Методы регистрации и наблюдения дифракции рентгеновских лучей	2
4	4	Рентгенофазовый анализ. Качественный рентгенофазовый анализ	2
5	4	Количественный рентгенофазовый анализ. Достоинства и ограничения метода. Области применения. Примеры.	2
6	5	Дифракция рентгеновских лучей от монокристаллов. Первый этап рентгеноструктурного анализа: определение параметров решетки и типа ячейки Браве; определение сингонии, дифракционной симметрии и возможной пространственной группы; получение данных по интенсивностям отражений для определения структуры.	2
7	5	Второй этап рентгеноструктурного анализа. Интегральная интенсивность, структурный фактор, электронная плотность. Фазовая проблема. Расшифровка и уточнение структуры. Фактор достоверности.	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	Дифракционные методы исследования. Сравнительная характеристика. Свойства рентгеновских лучей. Решение задач.	2
2	2	Элементы структурной кристаллографии: категории, сингонии, решетки Браве, пространственные группы, кристаллографические символы. Решение задач.	2
3	2	Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Вульфа-Бреггов. Решение задач.	2
4	4	Рентгенофазовый анализ. Решение задач.	2
5	4	Решение задач. Контрольная работа	2
6	5	Монокристалльный дифрактометр. Этапы рентгеноструктурного исследования.	2
7	5	Коллоквиум. Рентгеноструктурное исследование монокристаллов.	2

5.3. Лабораторные работы

№	№	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-
---	---	---	------

занятия	раздела		во часов
1	5	Работа с базой структурных данных CCDC и программой визуализации структур Mercury	4
2	5	Знакомство с принципом работы и устройством монокристалльного дифрактометра D8 QUEST (BRUKER) и с программным комплексом OLEX2 для расшифровки кристаллических структур	4
3	5	Расшифровка и уточнение структур в программном комплексе OLEX2	6

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка к лабораторным работам и оформлению отчета по лабораторным работам.	1. Устройство и принцип работы монокристалльного дифрактометра D8 QUEST (Bruker). 2. Шарутина, О. К. Молекулярные структуры органических соединений сурьмы (V) Текст монография О. К. Шарутина, В. В. Шарутин ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2012. - 394, [1] с. ил.	8	6
Решение задач, подготовка к контрольной работе	Задачи выдает преподаватель. Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 240 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/59459 — Загл. с экрана.	8	6
Самостоятельное изучение программ, находящихся в открытом доступе, необходимых для расшифровки экспериментальных данных и визуализации структур	SHELX - http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html ; Sir (Semi-Invariants Representation) - http://www.ba.ic.cnr.it/content/sir2011-v10-available ; WinGX - http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/ ; Olex2 - http://www.olex2.org/ ; Platon - http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/ ; Mercury - http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/ ;	8	7,75
Подготовка к зачету	1. Вегман, Е. Ф. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография Учебн. пособие для металлург. спец. вузов. - М.: Металлургия, 1990. - 264 с. ил. 2. Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 240 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/59459 — Загл. с экрана. 3. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия Текст учебник для вузов по специальности "Геология" Ю. К. Егоров-Тисменко ; под ред. В. С. Урусова ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Геол. фак. - 2-е изд. - М.: Университет, 2010. - 587 с.	8	6

6. Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	8	Текущий контроль	Блиц-опрос 1	0,1	6	Блиц-опрос на знание теоретического материала проводится на практическом занятии после изучения соответствующих тем по билетам, включающим 3 вопроса. Процедура занимает 15 минут. Каждый вопрос оценивается в 2 балла – правильный полный ответ, 1 балл – ответ краткий, вопрос полностью не раскрыт, 0 баллов – нет ответа.	зачет
2	8	Текущий контроль	Блиц-опрос 2	0,1	6	Блиц-опрос на знание теоретического материала проводится на практическом занятии после изучения соответствующих тем по билетам, включающим 3 вопроса. Время, отводимое на блиц-опрос – 15 минут. Каждый вопрос оценивается в 2 балла – правильный полный ответ, 1 балл – ответ краткий, вопрос полностью не раскрыт, 0 баллов – нет ответа.	зачет
3	8	Текущий контроль	Контрольная работа	0,2	10	Контрольная работа проводится письменно на практическом занятии по вариантам. В каждом варианте содержится 5 задач. Время, отведенное на выполнение контрольной работы, 90 минут. Критерии оценивания: правильно решенная и оформленная задача оценивается в 2 балла; 1,5 балла - принцип решения верен, но в расчете присутствует ошибка, повлекшая неправильный, но правдоподобный ответ; 1 балл - задача решена не полностью; 0,5 баллов - приведены расчетные формулы, но решение отсутствует; 0 баллов - принципиально неверный подход к решению, или решение отсутствует.	зачет
4	8	Текущий контроль	Диктант	0,1	10	Диктант проводится на лекции или практическом занятии. Процедура занимает 20 минут. За это время контролируется знание 10 терминов, понятий и определений из 15, со	зачет

						списком которых обучающиеся могут ознакомиться заранее. Каждый правильный и полный ответ оценивается в 1 балл, неполный ответ, но не содержащий ошибок – 0,5 баллов, нет ответа или неправильный ответ – 0 баллов.	
5	8	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 1	0,2	10	Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе. Каждый обучающийся работает индивидуально. Вариант работы содержит 3 задания, которые заключаются в поиске информации в базе структурных данных CCDC по различным признакам и работе с программой визуализации структур Mercury. Затем обучающийся оформляет и сдает отчет в печатном виде. 1 и 2 задания оцениваются по 2 балла. 2 балла – задание выполнено в полном объеме, библиографические ссылки на первоисточник приведены согласно ГОСТа. 1 балл – задание выполнено не полностью, приведены краткие библиографические ссылки. 0 баллов – задание не выполнено или не соответствует предложенному варианту. Максимальный балл за 3 задание равен 6. 6 баллов – задание выполнено в полном объеме, приведены полные библиографические ссылки, кристаллографические данные и описание координационного полиэдра центрального атома структуры оформлены в соответствии с требованиями к публикациям, имеются рисунки с номерами атомов. 4-5 баллов – задание выполнено в полном объеме, однако допущены ошибки в оформлении кристаллографических и структурных данных. 2-3 балла – задание выполнено не полностью, оформление небрежное, требования к оформлению не соблюдены. 1 балл – обучающийся присутствовал на занятии, но отчет не сдал. 0 баллов – лабораторная работа не выполнена. Контрольное мероприятие может быть зачтено только после защиты отчета, который дополнительно не оценивается.	зачет
6	8	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 2	0,1	10	Лабораторная работа проходит в Лаборатории рентгеноструктурных исследований и затем в компьютерном классе. Отчет по лабораторной работе представляет собой конспект, включающий 2 части. 1 часть – описание принципа работы и устройства монокристалльного дифрактометра D8 QUEST (BRUKER), порядок работы, требования к кристаллам, а также информацию об	зачет

					<p>экспериментальных данных, получаемых в результате съемки. 2 часть – описание программного комплекса Olex2 и последовательность расшифровки и уточнения структуры. Порядок начисления баллов: 6 баллов - отчет содержит полную информацию о приборе и может служить руководством к самостоятельной работе в программном комплексе Olex2. 4-5 баллов - отчет краткий, информация не полная, но грубые ошибки отсутствуют. 2-3 балла - отчет оформлен небрежно, последовательность расшифровки и уточнения структур в программном комплексе Olex2 нарушена. 1 балл - обучающийся присутствовал на лабораторной работе, но отчет отсутствует. 0 баллов - обучающийся не присутствовал на лабораторной работе. Максимальный балл за защиту отчета равен 4. 4 балла - обучающийся владеет изложенным в отчете материалом, отвечает на контрольные вопросы. 3 балла - обучающийся владеет изложенным в отчете материалом, однако при ответе на контрольные вопросы испытывает затруднения. 2 балла - обучающийся недостаточно хорошо владеет изложенным в отчете материалом, при ответе на контрольные вопросы испытывает затруднения. 1 балл - обучающийся недостаточно хорошо владеет изложенным в отчете материалом, ответил только на один из заданных вопросов. 0 баллов - обучающийся не владеет изложенным в отчете материалом, не ответил ни на один из заданных вопросов</p>		
7	8	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе № 3	0,2	10	<p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе. Каждый обучающийся получает индивидуальное задание и самостоятельно осуществляет расшифровку и уточнение двух структур на основании экспериментальных данных в программном комплексе OLEX2. Отчетом по лабораторной работе является отчет, сформированный программой в результате расшифровки и уточнения, и фото молекулы с рабочим полем программы. Максимальная оценка за каждую структуру 5 баллов. 5 баллов - обучающийся получает за полностью выполненную работу и отчет, не содержащий ошибок. 4 балла - структура расшифрована, но отчет содержит ошибки, например, некорректные номера атомов. 3 балла - структура расшифрована не до конца. 2 балла -</p>	зачет

						структура расшифрована не до конца, в отчете имеются ошибки. 1 балл - структура расшифрована, но с точки зрения теории химического строения не адекватна (не соблюдены валентности атомов, нарушен порядок связывания атомов в молекуле, нарушена электронейтральность комплекса и т.п.). 0 баллов – работа не выполнена. Контрольное мероприятие может быть зачтено только после защиты отчета, который дополнительно не оценивается.	
8	8	Промежуточная аттестация	Собеседование	1	4	Билет содержит 2 вопроса, каждый из которых оценивается в 2 балла. 2 балла - дан полный ответ на вопрос, обучающийся может вести дискуссию. 1,5 балла - дан ответ на вопрос, но обучающийся затрудняется в ответах на дополнительные вопросы по теме. 1 балл - ответ не полный, преподаватель вынужден задавать наводящие вопросы. 0,5 балла - ответ поверхностный, наводящие вопросы вызывают затруднения. 0 баллов - нет ответа.	зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
зачет	<p>На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля.</p> <p>Если рейтинг обучающегося по текущему контролю составляет не менее 60% от максимально возможного, то зачет выставляется автоматически. Если рейтинг обучающегося по текущему контролю менее 60%, зачет - необходимое мероприятие для получения промежуточной аттестации по дисциплине. Зачет проводится в форме письменного ответа на билет и последующего устного собеседования. В аудитории одновременно может находиться не более 6 обучающихся.</p> <p>Билет содержит два теоретических вопроса и одно практическое задание из тем, выносимых на зачет. Время для подготовки письменного ответа 30 минут. Собеседование проводится по вопросам билета, при неправильном или неполном ответе обучающемуся могут быть заданы уточняющие или новые вопросы по той же теме, а также по другим темам в рамках программы дисциплины.</p>	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Оценочные материалы

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ								
		1	2	3	4	5	6	7	8	
ПК-3	Знает: физические основы метода рентгеноструктурного анализа, возможности и ограничения метода, требования, предъявляемые к объектам исследования, принципы работы дифрактометров	+	+	+	+					

ПК-3	Умеет: применять теоретические знания при оценке возможности использования рентгеноструктурного анализа для исследования конкретных объектов	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
ПК-3	Имеет практический опыт: использования компьютерных программ для расшифровки и уточнения данных рентгеноструктурных исследований, визуализации полученных структур и их описания								+	+	+	+
ПК-5	Знает: основы физики рентгеновских лучей, взаимодействия рентгеновских лучей с веществом, практическое использование явления дифракции рентгеновских лучей в науке и технике	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ПК-5	Умеет: применять физические методы исследования, основанные на явлении дифракции, в профессиональной деятельности								+	+	+	+
ПК-5	Имеет практический опыт: интерпретации результатов экспериментальных исследований, проведенных методами рентгеноструктурного анализа								+	+	+	+

Фонды оценочных средств по каждому контрольному мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Вегман, Е. Ф. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография Учебн. пособие для металлург. спец. вузов. - М.: Металлургия, 1990. - 264 с. ил.

б) дополнительная литература:

1. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия [Текст] учебник для вузов по специальности "Геология" Ю. К. Егоров-Тисменко ; под ред. В. С. Урусова ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Геол. фак. - 3-е изд. - М.: Университет, 2014. - 587 с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Журнал неорганической химии
2. Координационная химия
3. Журнал структурной химии
4. Журнал общей химии

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Принцип работы и устройство рентгеновского монокристалльного дифрактометра D8 QUEST (BRUKER)

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Принцип работы и устройство рентгеновского монокристалльного дифрактометра D8 QUEST (BRUKER)

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной	Библиографическое описание
---	----------------	------------------------------------	----------------------------

		форме	
1	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 672 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/2152 — Загл. с экрана.
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 240 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/59459 — Загл. с экрана.
3	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Гуржий, В. В. Расшифровка кристаллических структур в программном комплексе OLEX2 : учебное пособие / В. В. Гуржий, А. А. Золотарев. — Санкт-Петербург : СПбГУ, 2017. — 79 с. — ISBN 978-5-288-05766-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/105360 (дата обращения: 17.06.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Панова, Т. В. Практическое применение методов рентгеноструктурного анализа : учебное пособие / Т. В. Панова. — Омск : ОмГУ, 2018. — 104 с. — ISBN 978-5-7779-2217-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/110890 (дата обращения: 21.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Зачет, диф.зачет	307 (1a)	Не предусмотрено
Контроль самостоятельной работы	208 (1a)	Компьютер со стандартным программным обеспечением, выход в интернет, база данных CCDC, специализированное программное обеспечение,
Лекции	202 (1a)	Компьютер со стандартным программным обеспечением, проектор, экран
Лабораторные занятия	208 (1a)	Компьютерный класс с ОС Windows XP, специализированное программное обеспечение, база данных CCDC
Практические занятия и семинары	202 (1a)	Компьютер со стандартным программным обеспечением, проектор, экран

Самостоятельная работа студента	208 (1а)	Компьютер со стандартным программным обеспечением, выход в интернет, база данных CCDC, специализированное программное обеспечение,
Лабораторные занятия	209 (1а)	Специализированная лаборатория с монокристалльным дифрактометром Bruker D8 QUEST, микроскопом для отбора кристаллов.