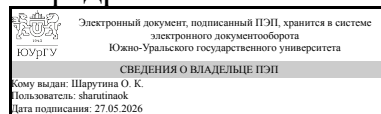


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий выпускающей  
кафедрой



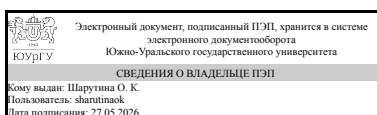
О. К. Шарутина

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.П0.08 Рентгеноструктурный анализ  
для направления 04.03.01 Химия  
уровень Бакалавриат  
профиль подготовки Химия  
форма обучения очная  
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

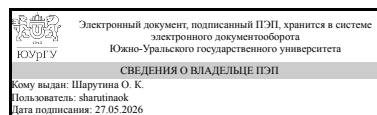
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

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



О. К. Шарутина

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



О. К. Шарутина

## 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<br>Умеет: применять теоретические знания при оценке возможности использования рентгеноструктурного анализа для исследования конкретных объектов<br>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<br>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 и программные средства на основе искусственного интеллекта,<br>Основы химии элементоорганических соединений,<br>Коллоидная химия,<br>Неорганический синтез,<br>Аналитическая химия,<br>Учебная практика (ознакомительная, ориентированная) (4 семестр),<br>Учебная практика (практика по получению первичных профессиональных умений и навыков, в том числе первичных умений и навыков научно-исследовательской деятельности) (2 семестр) | Не предусмотрены                            |

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

| Дисциплина            | Требования                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Неорганический синтез | Знает: предмет и объекты неорганического синтеза, теоретические основы методов синтеза неорганических соединений, теорию твердофазного, газофазного, жидкофазного синтеза, а также синтеза на границе раздела фаз неорганических соединений Умеет: обосновывать выбор подходов к синтезу, используя знания химических законов и свойств неорганических соединений, выбирать метод, прогнозировать оптимальные условия синтеза неорганических веществ, готовить объекты исследования для анализа, проводить экспериментальные исследования по заданной методике Имеет практический опыт: |
| Аналитическая химия   | Знает: принципы структурирования отчета по исследованиям, связанным с аналитическим определением, основные требования к его написанию, метрологические основы химического анализа, основы химических и физико-химических методов анализа, практику гравиметрического, титриметрического, кинетического, электрохимического, хроматографического и спектроскопического методов анализа, расчетные и графические                                                                                                                                                                          |

|                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|----------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                              | <p>методы решения типовых задач аналитической химии Умеет: составлять отчет о результатах работы в аналитической лаборатории и корректно представлять результат аналитического определения, оценивать пригодность и достоверность методики анализа, обрабатывать результаты анализа в соответствии с аттестованной методикой, экспериментально реализовать пропись методики анализа, выбрать химический или физико-химический метод анализа в соответствии с особенностью объекта исследования Имеет практический опыт: объяснения аналитических сигналов и валидаций методик анализа, проведения статистической обработки и корректного представления аналитических результатов, обращения с лабораторной и мерной посудой, аналитическими весами, стандартными аналитическими приборами, использования химических и физико-химических методов анализа для решения исследовательских и технологических задач, решения типовых задач аналитической химии</p> |
| Основы химии элементоорганических соединений | <p>Знает: факторы термодинамической и кинетической устойчивости элементоорганических соединений, их физические и химические свойства, основные методы синтеза элементоорганических соединений, особенности протекания процессов их получения Умеет: применять теоретические знания о свойствах элементоорганических соединений при выполнении экспериментальных исследований, а также для оценки возможности их использования для определенных целей, обосновать выбор метода синтеза необходимого элементоорганического соединения с учетом имеющихся ресурсов, предложить метод установления его структуры Имеет практический опыт:</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Коллоидная химия                             | <p>Знает: современные представления о дисперсном состоянии вещества, факторы устойчивости дисперсных систем, их особые свойства, значение поверхностных явлений для оптимизации и интенсификации технологических процессов в промышленности, экспериментальные методы исследования свойств дисперсных систем Умеет: получать дисперсные системы и изучать их свойства Имеет практический опыт: планирования и проведения исследования свойств дисперсных и коллоидных систем с применением соответствующего оборудования и приборов, обработки экспериментальных результатов с использованием методов математической статистики</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Физические методы исследования и             | Знает: основные принципы работы современного                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

|                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| программные средства на основе искусственного интеллекта                                                                                                                       | исследовательского оборудования, современные физические методы исследования, возможности, ограничения методов, основные принципы решения обратных задач с использованием современных информационных технологий<br>Умеет: выбрать физический метод исследования для оптимального решения поставленной задачи химической направленности, составлять алгоритм для решения обратных задач на примере современных исследовательских методов Имеет практический опыт: использования современной аппаратуры при проведении научных исследований в области химии, обработки спектроскопических и спектрометрических данных                                                                       |
| Учебная практика (ознакомительная, ориентированная) (4 семестр)                                                                                                                | Знает: области и сферы своей будущей профессиональной деятельности, профильные предприятия, организации, лаборатории в регионе, виды сырья и готовой продукции предприятий химической направленности, оснащение химико-аналитических лабораторий, типовые методики подготовки проб и проведения анализов в зависимости от специфики выполняемых работ Умеет: осуществлять поиск информации о специфике выполняемых работ, технологических процессах, входящих в производственный цикл предприятий региона, направленности работы химико-аналитических лабораторий на этих предприятиях Имеет практический опыт: формирования отчета заданной формы с использованием имеющейся информации |
| Учебная практика (практика по получению первичных профессиональных умений и навыков, в том числе первичных умений и навыков научно-исследовательской деятельности) (2 семестр) | Знает: значение информации при проведении научных исследований Умеет: пользоваться доступными источниками информации, в том числе справочниками, планировать и осуществлять синтез химических соединений из подобранных реагентов, выделять целевой продукт, устанавливать его физико-химические свойства Имеет практический опыт: самостоятельного поиска информации по заданной руководителем теме, синтеза неорганических веществ в лабораторных условиях с учетом свойств веществ и закономерностей протекания химических реакций                                                                                                                                                    |

#### 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          |
| Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по лабораторным работам.                                                                  | 6     | 6              |
| Решение задач, подготовка к контрольной работе                                                                                                  | 6     | 6              |
| Подготовка к зачету                                                                                                                             | 6     | 6              |
| Самостоятельное изучение программ, находящихся в открытом доступе, необходимых для расшифровки экспериментальных данных и визуализации структур | 7,75  | 7.75           |
| 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.                                                                                                                                                                        | 2            |

|  |  |                                                          |  |
|--|--|----------------------------------------------------------|--|
|  |  | Расшифровка и уточнение структуры. Фактор достоверности. |  |
|--|--|----------------------------------------------------------|--|

## 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

| № занятия | № раздела | Наименование или краткое содержание лабораторной работы                                                                                                                 | Кол-во часов |
|-----------|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 1         | 5         | Знакомство с базой структурных данных CCDC и работа с 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 оформление 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: <a href="http://e.lanbook.com/book/59459">http://e.lanbook.com/book/59459</a> — Загл. с экрана.                               | 8       | 6            |
| Подготовка к зачету                                                            | 1. Вегман, Е. Ф. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография                                                                                                                                                                                                                                 | 8       | 6            |

|                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |   |      |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|------|
|                                                                                                                                                 | Учебн. пособие для металлург. спец. вузов. - М.: Металлургия, 1990. - 264 с. ил. 2.<br>Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 240 с. — Режим доступа: <a href="http://e.lanbook.com/book/59459">http://e.lanbook.com/book/59459</a> — 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. ил.                                                                                                                         |   |      |
| Самостоятельное изучение программ, находящихся в открытом доступе, необходимых для расшифровки экспериментальных данных и визуализации структур | SHELX - <a href="http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html">http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html</a> ; Sir (Semi-Invariants Representation) - <a href="http://www.ba.ic.cnr.it/content/sir2011-v10-available">http://www.ba.ic.cnr.it/content/sir2011-v10-available</a> ; WinGX - <a href="http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/">http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/</a> ; Olex2 - <a href="http://www.olex2.org/">http://www.olex2.org/</a> ; Platon - <a href="http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/">http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/</a> ; Mercury - <a href="http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/">http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/</a> ; | 8 | 7,75 |

## 6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

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-мestr | 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                                                                                                | зачет            |

|   |   |                  |                                  |     |    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |       |
|---|---|------------------|----------------------------------|-----|----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
|   |   |                  |                                  |     |    | балла – правильный полный ответ, 1 балл – ответ краткий, вопрос полностью не раскрыт, 0 баллов – нет ответа.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |       |
| 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 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.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | зачет |
| 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 задание оценивается в 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 2 и 3 задания равен 4. 4 балла – задание выполнено в полном объеме, дано название химическому соединению, кристаллографические данные и описание координационного полиэдра центрального атома структуры оформлены в соответствии с требованиями к | зачет |

|   |   |                  |                                  |     |    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |       |
|---|---|------------------|----------------------------------|-----|----|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
|   |   |                  |                                  |     |    | публикациям, имеются рисунки с номерами атомов, приведены межмолекулярные контакты. 3 балла – задание выполнено в полном объеме, однако допущены ошибки в оформлении кристаллографических и структурных данных. 2 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.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |       |
| 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 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 | зачет |

|   |   |                          |                                  |     |    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |       |
|---|---|--------------------------|----------------------------------|-----|----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
|   |   |                          |                                  |     |    | 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |       |
| 7 | 8 | Текущий контроль         | Отчет по лабораторной работе № 3 | 0,2 | 10 | 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 - 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. | зачет |
| 8 | 8 | Промежуточная аттестация | Собеседование                    | -   | 4  | Билет содержит 2 вопроса, каждый и 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                        | Оценивание учебной деятельности обучающихся по | В соответствии с    |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                           |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|
|  | <p>дисциплине происходит на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля при условии выполнения всех контрольных мероприятий. Обучающийся вправе повысить свой рейтинг, пройдя процедуру промежуточной аттестации - зачета. 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> | пп. 2.5, 2.6<br>Положения |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|

### 6.3. Паспорт фонда оценочных средств

| 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                                              |      |    | +  |   |    | ++ | ++ |   |

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### Печатная учебно-методическая документация

#### а) основная литература:

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

#### б) дополнительная литература:

- 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 форме | Библиографическое описание                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|---|----------------------------------------------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | Дополнительная литература                                | ЭБС издательства Лань                    | Стожаров, В. М. Физика рентгеновского излучения / В. М. Стожаров. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2023. — 100 с. — ISBN 978-5-507-47076-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/324422">https://e.lanbook.com/book/324422</a> (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.                                                         |
| 2 | Дополнительная литература                                | ЭБС издательства Лань                    | Косенко, Н. Ф. Физические методы исследования тугоплавких неметаллических и силикатных материалов : учебное пособие / Н. Ф. Косенко, Т. В. Сазанова. — Иваново : ИГХТУ, 2015. — 123 с. — ISBN 978-5-9616-0509-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/96103">https://e.lanbook.com/book/96103</a> (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей. |
| 3 | Основная литература                                      | ЭБС издательства Лань                    | Юрченко, А. Н. Рентгенография металлов : учебное пособие / А. Н. Юрченко. — Пермь : ПНИПУ, 2023. — 73 с. — ISBN 978-5-398-02991-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/416438">https://e.lanbook.com/book/416438</a> (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.                                                                             |
| 4 | Методические пособия для самостоятельной работы студента | ЭБС издательства Лань                    | Юрченко, А. Н. Рентгенография металлов : методические рекомендации / А. Н. Юрченко. — Пермь : ПНИПУ, 2023. — 59 с. — ISBN 978-5-398-02992-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/416441">https://e.lanbook.com/book/416441</a> (дата обращения: 27.05.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.                                                                   |

### Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)
3. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ"  
(<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Cristallographic Data Centre(31.12.2023)

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

| Вид занятий                     | № ауд.      | Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий |
|---------------------------------|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лабораторные занятия            | 209<br>(1a) | Специализированная лаборатория с монокристалльным дифрактометром Bruker D8 QUEST, микроскопом для отбора кристаллов.                             |
| Контроль самостоятельной работы | 208<br>(1a) | Компьютер со стандартным программным обеспечением, выход в интернет, база данных CCDC, специализированное программное обеспечение,               |
| Зачет                           | 307<br>(1a) | Не предусмотрено                                                                                                                                 |
| Практические занятия и семинары | 202<br>(1a) | Компьютер со стандартным программным обеспечением, проектор, экран                                                                               |
| Лабораторные занятия            | 707<br>(1)  | Компьютерный класс с ОС Windows XP, специализированное программное обеспечение OLEX, база данных CCDC                                            |
| Лекции                          | 202<br>(1a) | Компьютер со стандартным программным обеспечением, проектор, экран                                                                               |
| Самостоятельная работа студента | 208<br>(1a) | Компьютер со стандартным программным обеспечением, выход в интернет, база данных CCDC, специализированное программное обеспечение,               |