

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.05.2026 12:28:37
Уникальный программный ключ:
ca953a01204891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»
Факультет физико-математических и естественных наук**
(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.04.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» входит в программу магистратуры «Фундаментальная и прикладная химия» по направлению 04.04.01 «Химия» и изучается во 2 семестре 1 курса. Дисциплину реализует Кафедра общей и неорганической химии. Дисциплина состоит из 5 разделов и 27 тем и направлена на изучение рентгендифракционных методов и кристаллической структуры соединений

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

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

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

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

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-2.2 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Рентгендифракционные методы в неорганической химии» относится к блоку по выбору блока образовательной программы высшего образования.

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

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

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в	Научно -исследовательская работа; Экспериментальные методы исследования в химии; Теоретическая органическая химия; Theoretical organic chemistry;	Термоаналитические методы в химии; Стереохимия; Химия твердого тела; Применение хроматографии в катализе; Stereochemistry;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Электрохимические методы исследования; Резонансные методы в химии;	Масс-спектрометрия органических соединений; Mass spectrometry of organic compounds; Современные проблемы менеджмента в химии; Физические методы исследования в катализе; Научно -исследовательская работа; Преддипломная практика;

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

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

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			2
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	54		54
Лекции (ЛК)	36		36
Лабораторные работы (ЛР)	18		18
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18		18
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	36		36
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108	108
	зач.ед.	3	3

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Природа рентгеновской дифракции	1.1	Природа рентгеновского излучения.	Открытие рентгеновских лучей. Природа рентгеновского излучения. Принципы работы рентгеновских аппаратов. Устройство рентгеновских трубок. Некоторые основные свойства рентгеновских лучей.	ЛК
		1.2	Рентгеновские спектры трубки, природа тормозного и характеристического спектра.	Рентгеновские спектры трубки, природа тормозного и характеристического спектра. Дифракция рентгеновских лучей. Параметры электромагнитной волны.	ЛК, ЛР
		1.3	Дифракция рентгеновских лучей . Условия Лауэ	Дифракция рентгеновских лучей атомным рядом из атомов одного и двух сортов. Дифракция трехмерной атомной решеткой. Условия Лауэ	ЛК, ЛР
		1.4	Дифракция как отражение. Уравнение Брэгга.	Индексы узловых сеток. Межплоскостные расстояния. Дифракция как отражение. Уравнение Брэгга.	ЛК, ЛР
		1.5	Обратная решетка. Сфера отражения. Векторная запись уравнения дифракции.	Обратная решетка, взаимосвязь параметров прямой и обратной решетки. Сфера отражения. Векторное уравнение дифракции.	ЛК, ЛР
Раздел 2	Методы получения дифракционного эффект	2.1	Методы рентгенографии: Метод порошка. Полихроматический метод. Метод вращения и качания.	Методы рентгенографии: Метод порошка. Полихроматический метод. Метод вращения и качания. Знакомство с устройством рентгеновского дифрактометра. XRD в зависимости от состояния материала. Приготовление образцов для исследований. Первичная обработка дифрактограмм.	ЛК
		2.2	Рентгенофазный анализ	Обработка дифрактограмм. Основные данные результатов обработки дифрактограммы. Характеристики пика. Идентификация фаз. Рентгенофазовый анализ. Знакомство с базами рентгендифракционных данных. Определение параметров элементарной ячейки исследуемых веществ. Порошковая рентгеновская дифракция и задачи.	ЛК, ЛР
		2.3	Схема и общие принципы работы дифрактометров	Схема и общие принципы работы 1-но, 2-х, 3-х и 4-х кружных дифрактометров.	ЛК, ЛР
		2.4	Новейшие методы получения и регистрации дифракционной картины	Новейшие методы получения и регистрации дифракционной картины. Точечные, линейные и координатные детекторы. Задачи рентгеноструктурного анализа кристаллов.	ЛК, ЛР
Раздел 3	Первый этап анализа структуры кристалла	3.1	Определение параметров ячейки по рентгенограммам.	Определение параметров ячейки по рентгенограммам. Зависимость межплоскостных расстояний от параметров	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				кристаллической структуры. Число формульных единиц в элементарной ячейке. Анализ условий погасания. Условия погасания в решетках разного типа.	
		3.2	Симметрия в кристаллическом пространстве. Решетки Бравэ	Твердые материалы. Основные свойства кристаллов. Симметрия в кристаллическом пространстве. Категории и сингонии. Стереографические проекции элементов симметрии и граней многогранников. Четырнадцать типов пространственных решеток Бравэ. Индексы и символы узлов, узловых рядов, узловых сеток. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Геометрические константы сингоний. Симметрия в кристаллическом пространстве. Открытые элементы симметрии. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения. Федоровские (пространственные) группы симметрии. Обозначение пространственных групп симметрии. Распределение их по сингониям, характерные их элементы симметрии.	ЛК, ЛР
		3.3	Симметрия кристаллов и симметрия лауэграмм. Лауэвские классы симметрии	Симметрия кристаллов и симметрия лауэграмм. 32 точечные группы симметрии. Правила установки. Построение стереографических проекций элементов симметрии соответствующих точечных групп. Закон Фриделя. Лауэвские классы симметрии. Открытые элементы симметрии. Обозначение пространственных групп симметрии. Элементарная ячейка. Ячейка Вигнера-Зейтца.	ЛК, ЛР
Раздел 4	Второй этап анализа структуры кристалла	4.1	Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновской дифракции.	Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновской дифракции: поляризационный, температурный, кинематический, адсорбционный, экстинкционный, атомный. Понятие о первичной и вторичной экстинкции, термодиффузном рассеянии	ЛК
		4.2	Фактор атомного рассеяния рентгеновских лучей.	Фактор атомного рассеяния рентгеновских лучей. Рассеивающая способность электрона, атома, иона, валентных электронов и атомного остова.	ЛК, ЛР
		4.3	Понятие структурной амплитуды. Закон сложения когерентных волн.	Общий закон интерференции. Понятие структурной амплитуды. Закон сложения когерентных волн. Структурная амплитуда и координаты атомов. Определение фазы δ_j рентгеновского луча рассеянного j -том атомом относительно начало координат элементарной ячейки.	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы	Содержание темы	Вид учебной работы*
		4.4 Преобразование Фурье и представление электронной плотности рядом Фурье.	Виды преобразований Фурье в РСА и представление электронной плотности рядом Фурье. Формула электронной плотности для centrosymmetric кристалла. Вторая главная формула РСА. Учет симметрии в структурных амплитудах и электронной плотности.	ЛК, ЛР
		4.5 Проблема начальных фаз в рентгеноструктурном анализе.	Проблема начальных фаз в рентгеноструктурном анализе. Необходимость опорных данных (координаты тяжелых атомов, начальные фазы сильных отражений). Общая схема последовательного выявления всех атомов	ЛК, ЛР
		4.6 Функция Паттерсона (межатомная функция).	Функция Паттерсона (межатомная функция), ее запись, интерпретация. Определение атомных координат по межатомной функции. Метод тяжелого атома. Достоинства и недостатки.	ЛК, ЛР
		4.7 «Прямые» методы решения структур кристаллов (основные понятия).	«Прямые» методы решения структур кристаллов (основные понятия). Особенности расшифровки centrosymmetric и неcentrosymmetric структур. Метод суперпозиции атомов	ЛК
		4.8 Метод тяжелого атома, виды Фурье – синтезов	Метод тяжелого атома в решении структур кристаллов, виды Фурье – синтезов: полная электронная экспериментальная или теоретическая плотность, разностная плотность, деформационная электронная плотность.	ЛК, ЛР
		4.9 Уточнение атомных координат методом наименьших квадратов.	Метод минимизации структурного функционала. Уточнение атомных координат методом наименьших квадратов. Индексы расходимости (или R-факторы) - точечные индикаторы процесса сходимости уточнения. Индикатор качества уточняемой модели. Статистический критерий dR_q .	ЛК, ЛР
		4.10 Влияние температуры на рентгенодифракционную картину.	Влияние температуры на рентгенодифракционную картину. Температурный фактор атома - изотропный и анизотропный, учет агармонизма. Формы его записи, тепловой эллипсоид. Уточнение параметров тепловых колебаний.	ЛК
		4.11 Общая схема основных этапов рентгеноструктурного анализа	Общая схема основных этапов рентгеноструктурного анализа: стартовое приближение, рассеивающая способность атомов, приближенный расчет структурной амплитуды с учетом известных положений, как правило, более тяжелых атомов или примерных начальных фаз структурных амплитуд, определение положения средних атомов, уточнение положения и тепловых	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				параметров атомов, построение разностных карт для выявления водородных атомов. Задачи, решаемые в ходе рентгеноструктурного анализа кристаллов.	
Раздел 5	Решение структурных задач дифракционными методами	5.1	Аномальное рассеяние рентгеновских лучей.	Учет аномального рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах, понижение симметрии, определение абсолютной конфигурации. Методы учета - плюсы и минусы.	ЛК
		5.2	Сравнительные возможности рентгеноструктурного, нейтронографического и электронографического методов в определении структуры молекул	Сравнительные возможности рентгеноструктурного, нейтронографического и электронографического методов в определении структуры молекул. Особенности, достоинства и недостатки. Степень размытости максимумов рассеивающей функции. Сходимость рядов Фурье. Аппаратура для дифракционных исследований. Требование к исследуемому образцу.	ЛК, ЛР
		5.3	Полнопрофильный анализ. Микроструктура. Метод Ритвельда	Полнопрофильный анализ. Дифракционный экспериментальный профиль. Используемые аналитические функции - достоинства и недостатки. Определение микроструктуры. Метод Вильямсона-Холла. Метод Ритвельда	ЛК, ЛР
		5.4	Прецизионный рентгеноструктурный анализ.	Прецизионный рентгеноструктурный анализ, понятие о разностной и деформационной электронной плотности. Химическая связь в кристаллах. Электрон-динамические характеристики.	ЛК, ЛР

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

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Проектор, ноутбук или мультимедийная доска
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Набор решеток Браве и кристаллических решеток, Рентгеновские дифрактометры для поликристаллических исследований Tongda TD-3700, TDM-20, ДРОН-7, компьютеры. Пакет программ для рентгendifракционных исследований (НПП «Буревестник»). Пакет программ для обработки спектров и расчета характеристик по рентгendifракционным данным, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН.
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Лаборатория рентгенографии и кристаллохимии 115, 117

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Методы исследования материалов и процессов : Учебное пособие для вузов / В.Ю. Конюхов, И.А. Гоголадзе, З.В. Мурга. - 2-е изд., испр. и доп. - М. : Юрайт, 2018. - 226 с. - (Университеты России). - ISBN 978-5-534-05475-0 : 459.00.
<https://biblio-online.ru/viewer/metody-issledovaniya-materialov-i-processov-439014#page/1>

2. Анисович, А.Г. Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения : научное издание / Национальная академия наук Беларуси. - Минск : Беларуская навука, 2017. - 209 с. : ил. - Библиогр.: с.199-205 - ISBN 978-985-08-2112-6 ; То же [Электронный ресурс].
http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=483969

3. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ : учебное пособие / Г.В. Фетисов ; ред. Л.А. Асланов. - Москва : Физматлит, 2007. - 673 с. - ISBN 978-5-9221-0805-8
http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=76647

Дополнительная литература:

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

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

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

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=241003

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

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

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<https://mega.rudn.ru/MegaPro/Web>

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

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

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Знаниум» <https://znanium.ru/>

2. Базы данных и поисковые системы

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

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

- Sage <https://journals.sagepub.com/>

- Springer Nature Link <https://link.springer.com/>

- Wiley Journal Database <https://onlinelibrary.wiley.com/>

- Научометрическая база данных Lens.org <https://www.lens.org>

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

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

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

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Лобанов Николай
Николаевич

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Подпись

Хрусталев Виктор
Николаевич

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой

Должность, БУП

Подпись

Воскресенский Леонид
Геннадьевич

Фамилия И.О.