

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Гаскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор	МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)	
Дата подписания: 17.06.2025 15:43:55 Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8322323	Рабочая программа дисциплины "Определение кристаллических структур" по направлению подготовки (специальности) 03.04.02 "Физика" направленности (профилю) Физика конденсированного состояния вещества ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1

## Рабочая программа дисциплины (модуля)\*

Определение кристаллических структур

Направление подготовки (специальность)

03.04.02 Физика

Направленность (профиль)

Физика конденсированного состояния вещества

Присваиваемая квалификация (степень)

магистр

Форма обучения

очная

Год(ы) набора 2025

\*Рабочая программа дисциплины (модуля) адаптирована для инклюзивного обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Челябинск 2025 г.



## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля)
5. Структура и содержание дисциплины (модуля)
6. Фонд оценочных средств
  - 6.1. Перечень видов оценочных средств
  - 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации
  - 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации
  - 6.4. Критерии оценивания
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)
  - 7.1. Рекомендуемая литература
  - 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"
  - 7.3. Перечень информационных технологий
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Специальные условия освоения дисциплины обучающимися с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья



### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями дисциплины «Определение кристаллических структур» являются изучение теоретических основ методов расшифровки кристаллических структур по данным дифракционных экспериментов, овладение приемами использования этих методов в исследовательской работе, знакомство с современными программными комплексами для структурного анализа.

Задачи дисциплины:

1. Изучение процессов рассеяния рентгеновских лучей кристаллом.
2. Изучение методов решения фазовой проблемы и определения координат атомов в элементарной ячейке кристалла.
3. Овладение навыками работы с программными комплексами для структурного анализа.

Результаты обучения по дисциплине направлены на достижение индикаторов:

ПК-2.1. Обладает знаниями о передовом отечественном и зарубежном опыте эксплуатации и технического обслуживания электронного оборудования.

ПК-2.2. Демонстрирует умение ставить научные задачи в области физики конденсированного состояния вещества и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта

ПК-2.3. Имеет практический опыт (навыки) проведения научно-исследовательских работ, опираясь на использование современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта

### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Цикл (раздел) ОПОП: Б1.В.ДВ.02.01

#### 2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Для успешного усвоения дисциплины «Определение кристаллических структур» обучающиеся должны изучить такие дисциплины, как физика конденсированного состояния вещества, оптика, кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия, образование кристаллов.

Фазовые превращения в дисперсных системах

Современные технологии поиска и обработки информации

Образование кристаллов

Физика фазовых переходов

#### 2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

Производственная практика (преддипломная практика)

Производственная практика (научно-исследовательская работа)

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**ПК-2: Способность ставить научные задачи в области физики конденсированного состояния вещества и решать их с использованием современного оборудования и отечественного и зарубежного опыта**

**Знать:**

Для достижения ПК-2.1: методы решения фазовой проблемы

**Уметь:**

Для достижения ПК-2.2: выбирать условия эксперимента и средства обработки его результатов

**Владеть:**

Для достижения ПК-2.3: навыками использования кристаллографических баз данных

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен**

**3.1 Знать:**

3.1.1 теоретические основы определения структуры на основе результатов дифракционного эксперимента

**3.2 Уметь:**



Рабочая программа дисциплины "Определение кристаллических структур" по направлению подготовки (специальности) 03.04.02 "Физика" направленности (профилю) Физика конденсированного состояния вещества ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 4

3.2.1 применять на практике методы определения кристаллических структур

**3.3 Владеть:**

3.3.1 навыками работы с программными комплексами для структурного анализа

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость	2 ЗЕТ
Часов по учебному плану : 72	Виды контроля в семестрах: экзамены 3
в том числе :	
аудиторные занятия : 12	
самостоятельная работа : 18,6	
часов на контроль : 36	
контактная работа: 17,4	
ИКР: 5,4	

#### 5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература
	<b>Раздел 1. Введение. Фазовая проблема. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом</b>			
1.1	Структурный анализ как преобразование Фурье. Два этапа структурного анализа. Фазовая проблема. /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
1.2	Рассеяние рентгеновских лучей идеальным и реальным кристаллом. Структурная амплитуда отражения. Интенсивность отражения. /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
1.3	Атомные амплитуды рассеяния рентгеновских лучей, методы расчета /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.4	Правила погасаний для пространственных групп. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.5	Методы получения дифракционной картины от моно- и поликристаллов. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.6	Измерение интенсивностей дифракционных максимумов. Поправки на поглощение и преимущественную ориентацию кристаллов. /Ср/	3	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
	<b>Раздел 2. Методы определения кристаллических структур</b>			
2.1	Метод проб и ошибок. Метод Ритвельда. Пример определения структуры /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
2.2	Функция Паттерсона. Разложение в ряд Фурье. Анализ распределений межатомной функции на основе симметрии кристалла. Карты электронной плотности. Пример использования функции Паттерсона для определения структуры кристалла. /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4



2.3	Методы неравенств. Детерминант Карла-Хауптмана. Статистические методы. Практические приемы. /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
2.4	Методы оценки достоверности определения структур. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
2.5	Определение структур методом межатомной функции. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
2.6	Функции профиля дифракционных максимумов. Уширение дифракционных максимумов. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
2.7	Метод наименьших квадратов. Функции минимизации. /Ср/	3	1,6	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
<b>Раздел 3. Программные комплексы для структурного анализа</b>				
3.1	Программные комплексы реализующие метод Ритвельда (GSAS, FullProf, Rietan). Программа определения структур с помощью прямых методов SHELX. /Лек/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
3.2	Структуры входных и выходных файлов программных комплексов для структурного анализа. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
3.3	Программы для визуализации структурных данных. /Ср/	3	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
<b>Раздел 4. Иная контактная работа</b>				
4.1	Индивидуальные консультации, текущий контроль /ИКР/	3	5,4	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5

## 6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 6.1. Перечень видов оценочных средств

Устный опрос, Вопросы к экзамену

### 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации

Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации представлены в Фондах оценочных средств

### 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации представлены в Фондах оценочных средств

Вопросы к экзамену:

1. Структурный анализ как преобразование Фурье.
2. Рассеяние рентгеновских лучей электроном и атомом.
3. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Факторы интегральности, поглощения, повторяемости, тепловой.
4. Структурная амплитуда. Расчет для различных пространственных групп.
5. Метод проб и ошибок.



6. Метод Ритвельда.
7. Функция Паттерсона.
8. Определение структуры путем анализа распределения функции Паттерсона.
9. Прямые методы. Основы.
10. Прямые методы. Методы неравенств.
11. Прямые методы. Статистические методы.
12. Детерминант Карле-Хауптмана.
13. Неравенство Харкера-Каспера
14. Уравнение Сэйра.
15. Основные этапы расшифровки кристаллических структур.
16. Расшифровка структур соединений с неизвестной химической формулой.
17. Тепловое диффузное рассеяние
18. Учет анизотропии тепловых колебаний атомов.
19. Атомный фактор рассеяния. Методы расчета.
20. Фазовая проблема.

#### 6.4. Критерии оценивания

Оценка уровня освоения программы производится в ходе экзамена, проводимого в устно-письменной форме в конце 3-го семестра по темам аудиторных занятий, а также по темам, выносимым на СРС. Оценка «отлично» ставится при условии полного и глубокого освоения материала курса, включая умение применять полученные знания для решения простых задач. Оценка «хорошо» ставится при условии освоения материала курса. Оценка «удовлетворительно» ставится в случае освоения студентом основных понятий и законов в рамках материала курса. Оценка «неудовлетворительно» ставится в случае отсутствия у студента базовых знаний по курсу в целом, либо по отдельным его частям.

### 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

#### 7.1. Рекомендуемая литература

##### 7.1.1. Основная литература

	Авторы,	Заглавие	Издательство,	Ресурс
Л1.1	Бокий Г. Б.	Практический курс рентгеноструктурного анализа: монография ( <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475622">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475622</a> )	Москва : Издательство МГУ, 1951	ЭБС
Л1.2	Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н.	Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия: учебник для вузов	Москва : Металлургия, 1982	
Л1.3	Анисович А. Г.	Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения: монография ( <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=483969">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=483969</a> )	Минск : Беларуская навука, 2017	ЭБС

##### 7.1.2. Дополнительная литература

	Авторы,	Заглавие	Издательство,	Ресурс
Л2.1	Болдырев А. К.	Кристаллография: научная литература ( <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=230330">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=230330</a> )	Ленинград, Москва, Грозный, Новосибирск : ОНТИ НКТП СССР, 1934	ЭБС
Л2.2	Китайгородский А. И.	Теория структурного анализа: монография ( <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475614">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475614</a> )	Москва : Издательство академии наук СССР, 1957	ЭБС
Л2.3	Бокий Г. Б.	Рентгеноструктурный анализ: монография ( <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475623">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=475623</a> )	Москва : Издательство МГУ, 1964	ЭБС
Л2.4	Гинье А., Белов Н. В., Белова Е. Н.	Рентгенография кристаллов: теория и практика	Москва : Физматгиз, 1961	



	Авторы,	Заглавие	Издательство,	Ресурс
Л2.5	Порай-Кошиц М. А, Бокий Г. Б.	Практический курс рентгеноструктурного анализа: учебное пособие для государственных университетов	Москва: Издательство МГУ,	

### 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Лань [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Лань. URL: <a href="http://e.lanbook.com/">http://e.lanbook.com/</a>
Э2	Университетская библиотека онлайн [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / ООО Директмедиа Паблишинг. URL: <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>
Э3	Юрайт [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Юрайт. URL: <a href="https://urait.ru">https://urait.ru</a>
Э4	Znanium.com [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / Научно-издательский центр ИНФРА-М. URL: <a href="http://znanium.com/">http://znanium.com/</a>
Э5	eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. URL: <a href="http://elibrary.ru/defaultx.asp">http://elibrary.ru/defaultx.asp</a>

### 7.3 Перечень информационных технологий

#### 7.3.1 Программное обеспечение

Adobe Reader
WinDjView
LibreOffice
LMS Moodle
Adobe Connect Acrobat
OpenOffice
Ubuntu Linux
ПО Kaspersky

#### 7.3.2 Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы

1. Электронный каталог научной библиотеки ЧелГУ [Электронный ресурс] : база данных / Челяб. гос. ун-т. – Челябинск, 1992.
2. APS JOURNALS. Physical Review Letters, Physical Review X, Physical Review, and Reviews of Modern Physics : журналы American Physical Society : сайт. – URL: <a href="http://journals.aps.org/about">http://journals.aps.org/about</a> – Яз. англ. – Режим доступа: только из сети университета. – Текст : электронный.
3. Web of Science : мультидисциплинарная реферативная база данных / компания Thomson Reuters. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.
4. Scopus : реферативная база данных / Elsevier BV. – URL: <a href="http://www.scopus.com/">http://www.scopus.com/</a> – Яз. англ. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.
5. Springer Link : [сайт]. – URL: <a href="http://link.springer.com/">http://link.springer.com/</a> – Яз. англ. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.
6. Электронный вариант пособия А.С. Larson and R.B. Von Dreele, General Structure Analysis System (GSAS), Los Alamos National Laboratory Report LAUR 86-748 (2004).
7. Электронные варианты работ: A.L. Patterson. A Fourier Series Method for the Determination of the Components of Interatomic Distances in Crystals H.M. Rietveld. A profile refinement method for nuclear and magnetic structures

## 8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.
Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения - мультимедийным оборудованием (экран, ноутбук, проектор, колонки).
Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий (мультимедийные презентации).



Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с подключением к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

## 9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Студенту следует равномерно в течение семестра распределять учебную нагрузку по проработке лекционного материала, самостоятельной работе по темам, выносимым на СРС. При возникновении вопросов по темам, выносимым на СРС, следует обратиться за консультацией к преподавателю, ведущему лекционные занятия. В случае применения при обучении дисциплины электронного обучения, дистанционных образовательных технологий общение обучающихся и преподавателя осуществляется в режиме реального времени (онлайн-лекции (вебинары), чаты, видео-конференции и др.) или отложенного времени (система дистанционного обучения Moodle, MS Office365, форумы, электронная почта и др.).

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья электронное обучение, дистанционные образовательные технологии предусматривают возможность приема-передачи информации в доступных для них формах.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий (далее – ЭО, ДОТ) осуществляется на основании «Положения о реализации основных и дополнительных образовательных программ с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Челябинский государственный университет», «Положения о порядке зачета обучающимися по основным профессиональным образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «ЧелГУ» результатов освоения в организациях, осуществляющих образовательную деятельность, учебных предметов, курсов, дисциплин (модулей), практик, дополнительных образовательных программ» посредством электронной информационно-образовательной среды ФГБОУ ВО «ЧелГУ». В исключительных случаях (форс-мажор и т.п.) при реализации образовательной деятельности с применением ЭО, ДОТ могут применяться компоненты, не входящие в перечень электронной информационно-образовательной среды.

## 10. СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ОБУЧАЮЩИМИСЯ С ИНВАЛИДНОСТЬЮ И ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием специальных технических средств и информационных технологий, предоставляемых Ресурсным учебно-методическим центром по обучению инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ЧелГУ по запросу обучающегося (мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями зрения и с нарушением слуха, ассистивные информационные технологии).

При необходимости для обучающихся с нарушениями зрения на рабочих местах для проведения практических или лабораторных занятий устанавливается специальное программное обеспечение (программа речевой навигации, речевые синтезаторы, экранные лупы).

В учебных аудитории обеспечивается беспрепятственный доступ для обучающихся с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья. В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, предусматривается соответствующее количество мест для обучающихся с учетом нарушений их здоровья.

Для освоения дисциплины инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется доступ к печатным источникам, имеющимся в научной библиотеке ЧелГУ, с помощью специальных технических средств; доступ с помощью специальных технических и программных средств к электронным источникам, представленным в форме электронного документа в фонде научной библиотеки ЧелГУ или электронно-библиотечных системах.

Учебно-методические материалы для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и особенностям восприятия информации.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья освоение дисциплины может быть частично или полностью осуществлено с использованием дистанционных образовательных технологий.

При проведении промежуточной аттестации по дисциплине обучающимся с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья обеспечивается по их заявлению предоставление в доступной форме в зависимости от их индивидуальных особенностей инструкции о порядке проведения промежуточной аттестации, оценочных средств и возможности ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, письменно шрифтом Брайля, с использованием услуг ассистента, устно).

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование предоставленных ЧелГУ или собственных технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. При необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на задания,



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)

Рабочая программа дисциплины "Определение кристаллических структур" по направлению подготовки  
(специальности) 03.04.02 "Физика" направленности (профилю) Физика конденсированного состояния  
вещества ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 9

процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

