

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра нанотехнологий и микросистемной техники

**Авторы-составители: Семенова Оксана Рифовна
Волынцев Анатолий Борисович**

Рабочая программа дисциплины
ДИФРАКЦИОННЫЙ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ
Код УМК 93714

Утверждено
Протокол №9
от «13» мая 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Дифракционный структурный анализ

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в обязательную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **28.03.01** Нанотехнологии и микросистемная техника
направленность Материалы микро- и наносистемной техники

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Дифракционный структурный анализ** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность : Материалы микро- и наносистемной техники)

ПК.1 Способен исследовать и контролировать структуру вещества на атомно-молекулярном уровне с помощью различных инструментальных методов

Индикаторы

ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность: Материалы микро- и наносистемной техники)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	10,11
Объем дисциплины (з.е.)	8
Объем дисциплины (ак.час.)	288
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	112
Проведение лекционных занятий	42
Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку	70
Самостоятельная работа (ак.час.)	176
Формы текущего контроля	Письменное контрольное мероприятие (9)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (10 триместр) Экзамен (11 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Дифракционный структурный анализ. Триместр 1.

Основные методы дифракционного структурного анализа

Нейтроннография, электронография, рентгенография

Рентгеновские лучи и их взаимодействие с веществом

Физика рентгеновских лучей

Природа и принцип получения рентгеновских лучей. Спектры рентгеновских лучей (сплошной, характеристический).

Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом

Общая картина взаимодействия рентгеновских лучей с веществом. Истинное атомное поглощения. Некогерентное (квантовое) рассеяние. Когерентное рассеяние.

Рассеяние рентгеновских лучей электроном, атомом

Рассеяние рентгеновских лучей свободным электроном. Рассеяние рентгеновских лучей атомом. Дисперсионные поправки к атомной амплитуде рассеяния.

Рассеяние рентгеновских лучей кристаллами

Рассеяние рентгеновских лучей простой кристаллической решеткой

Дифракция рентгеновских лучей в одномерной, двухмерной, трехмерной решетках. Уравнения Лауэ. Геометрия дифракционной картины. Вид рентгенограмм. Условия возникновения дифракции .

Дифракция как отражение

Уравнение Вульфа-Брэгга. Основные методы РСА. Связь между индексами дифракции и индексами плоскостей. Интерференционное уравнение трехмерной решетки. Геометрический смысл дифракционного вектора. Сфера отражения. Интерпретация методов рентгеноструктурного анализа с помощью сферы отражения и обратной решетки: метод порошков, метод Лауэ, метод вращения.

Рассеяние рентгеновских лучей сложной кристаллической решеткой

Структурная амплитуда элементарной ячейки. Структурная амплитуда различных решеток Бравэ. Законы погасания для решеток Бравэ. Структурная амплитуда вставленных друг в друга сложных решеток. Структурный фактор решеток с параметрами. Теорема Фриделя. Центр симметрии и структурная амплитуда. Лауэвские классы и рентгеновские пространственные группы.

Основные методы рентгеноструктурного анализ

Метод Лауэ

Геометрия и закономерности дифракционной картины; зональные кривые. Лауэграммы, эпиграммы и их расчет. Построение кристаллографических проекций: гномонической, гномостереографической. Симметрия лауэграмм и эпиграмм. Применение метода Лауэ. Определение сингонии кристаллов по сводной гномостереографической проекции. Определение ориентировки не ограненных кубических монокристаллов.

Метод Дебая (порошков)

Геометрия дифракционной картины и вид рентгенограммы. Расчет рентгенограмм поликристаллов. Аналитические и графические методы индцирования рентгенограмм кристаллов различной сингонии. Точность определения межплоскостных расстояний и меры к ее увеличению. Источники погрешностей в определении межплоскостных расстояний для фотометода. Методы экстраполяции, метод съемки с

внутренним стандартом, использование камер для "обратной съемки". Методы фокусирования линий. Рентгеновские дифрактометры. Систематические погрешности при съемке на дифрактометре.

Метод вращения

Геометрия дифракционной картины и вид рентгенограмм; слоевые линии. Расчет рентгенограмм вращения. Определение периода идентичности, периодов решетки, типа решетки Бравэ, объема элементарной ячейки и числа частиц в ней. Индексирование рентгенограмм вращения. Интерференционные кривые и их использование для индексирования рентгенограмм вращения и определения типа решетки Бравэ. Рентгеновские гониометры.

Метод порошков для кристаллов кубической сингоний

Метод порошков является основным методом исследования различных материалов и широко применяется на практике. Этот метод также называют по имени ученых, его предложивших, - методом Дебая-Шеррера-Хэлла. Основные области применения метода включают: идентификация образца; качественный и количественный фазовый анализ; определение размеров элементарной ячейки; исследование внутренних и внешних напряжений, а также искажений кристаллической решетки. При исследовании применяются образцы из поликристаллического вещества или порошка, состоящего из большого числа мелких (менее 0.01 мм) кристаллитов (зерен), имеющих произвольную ориентацию в пространстве. При освещении таких образцов монохроматическим или характеристическим рентгеновским излучением возникает отчетливый интерференционный эффект в виде системы коаксиальных конусов, осью которых является первичный луч.

Определение ориентировки монокристалла методом Лауэ

Метод Лауэ (или полихроматический метод) - один из трех основных методов рентгеноструктурного анализа. В этом методе пучок излучения с непрерывным (белым) спектром падает на неподвижный монокристалл. Дифракционная картина регистрируется на неподвижную фотопленку. Являясь исторически первым методом структурного анализа, метод Лауэ, однако, мало применяется как самостоятельный, так как имеются более совершенные методы. Но в некоторых случаях он сохранил свою ценность в процессе исследования структуры. Например, большую роль метод Лауэ играет при исследовании монокристаллических веществ, обычно не имеющих правильной внешней огранки, которая позволила бы судить об ориентировке кристаллографических осей. Кроме того, метод Лауэ является практически единственным, позволяющим быстро оценить качество кристалла.

Метод вращения

Метод вращения является основным при определении атомной структуры кристаллов. Этим методом определяют размеры элементарной ячейки, число атомов или молекул, приходящихся на одну ячейку. По погасаниям отражений находят пространственную группу (с точностью до центра инверсии). Данные по измерению интенсивности дифракционных максимумов используют при вычислениях, связанных с определением атомной структуры.

Дифракционная картина получается при облучении вращающегося монокристалла монохроматическим рентгеновским излучением. В качестве последнего используется характеристическое излучение анода рентгеновской трубки. В большинстве случаев дифракционная картина регистрируется на цилиндрической пленке, окружающей кристалл так, что ось цилиндра совпадает с осью вращения, которая, как правило, перпендикулярна первичному рентгеновскому лучу.

Рассеяние рентгеновских лучей "малым" кристаллом

Интерференционная функция. Анализ интерференционной функции. Протяженность и форма узлов обратной решетки.

Интегральная интенсивность. Интегральное отражение

При решении многих задач структурного анализа (например, при определении структуры вещества, его характеристической температуры, искажений кристаллической решетки, при количественном фазовом анализе, изучении сверхструктуры и др.) приходится учитывать не только взаимное расположение линий рентгенограммы, но и соотношение их интенсивностей. Количественную характеристику интенсивности можно получить с помощью микрофотометра, если линии зарегистрированы на фотопленке, или счетчика рентгеновских квантов, если для исследования вещества используется дифрактометр.

Рабочие формулы интенсивности для различных методов.

Метод Лауэ. Метод вращения. Метод "порошков"

Факторы интегральной интенсивности

Множители Лоренца, поглощения, геометрический, повторяемости.

Фактор повторяемости

Фактор повторяемости в методе Дебая. Формула интегрального отражения для кристаллического порошка, цилиндрического образца. Фактор повторяемости в методе вращения.

Абсорбционный фактор

Сечение луча меньше сечения кристалла. Односторонний и двухсторонний случаи. Нулевая слоевая линия. Брэгговский и лауэвский случаи. Оптимальные толщины образцов при рентгено съемке на "просвет". Сечение луча больше сечения кристалла, цилиндрический образец.

Влияние случайных неправильностей кристаллической решетки

Известно, что характер кристаллической структуры вещества и величина межатомных сил связи в значительной степени определяют все многообразие его физических свойств. Характеристическая температура, являясь характеристикой сил межатомного взаимодействия в кристаллической решетке, входит в аналитические выражения многих физических величин (теплоемкости, электрической проводимости, коэффициентов диффузии, сжимаемости и др.); она связана с упругими постоянными и температурой плавления, влияет на интенсивность рентгеновских линий.

Статические искажения решетки возникают в результате деформации материала или взаимодействия разнородных атомов в твердом растворе. Определение величины искажений или их изменений дает информацию о соответствующих изменениях в решетке и помогает выяснить возможное влияние последних на макроскопические свойства вещества. Поэтому изучение экспериментальных методов определения характеристической температуры и статических искажений представляет несомненный интерес.

Влияние тепловых колебаний.

Температурный фактор. Трансформация селективных максимумов и диффузного рассеяния под влиянием дефектов.

Динамические и статические искажения.

Определение динамических искажений и характеристической температуры. Определение статических искажений.

Принципы динамической теории рассеяния

Идеальный и мозаичный кристаллы

Определение идеального и мозаичного кристаллов. Интенсивности рассеяния мозаичным кристаллом и

поликристаллом. Подсчет интегрального отражения для идеально-мозаичного кристалла методом "лауэвского" суммирования.

Учет экстинкции

Первичная и вторичная экстинкция. Определение блоков по эффекту первичной экстинкции.

Определение размеров и формы весьма малых частиц и пор

Определение размеров и формы весьма малых частиц и пор по рассеянию рентгеновских лучей под малыми углами

Эксперимент. Камера Кратки. Вывод формулы интенсивности рассеянных рентгеновских лучей под малыми углами. Метод касательных. Двойное брегговское отражение.

Узлы обратной решетки

Формы и размеры узлов обратной решетки. Использование узла обратной решетки для определения размеров объекта.

Дифракционный структурный анализ. Триместр 2.

Рассеяние рентгеновских лучей изотропными кристаллами

Интенсивность рассеянных рентгеновских лучей

Пути расчета. Вывод формулы интенсивности рассеянных рентгеновских лучей. Структурный анализ газов, эксперимент. Рентгенография жидких и аморфных систем.

Атомная плотность

Радиальное распределение атомной плотности. Координационные сферы.

Структурный анализ с оценкой интенсивности

ДСА как преобразование Фурье

Метод рядов электронной плотности. Фурье-анализ и Фурье-синтез. Ряды Фурье. Трехмерные ряды и их сечения. Проекция рядов электронной плотности.

Метод межатомной функции

"Векторное" пространство и межатомная функция. Аналогия между структурной амплитудой и структурным фактором. Пространство межатомных векторов. Межатомная функция (функция Паттерсона). Свойства межатомной функции. Разложение в ряд Фурье. Сечения и проекции межатомной функции.

Дифракционный анализ реальных кристаллов и методы анализа дифракционных картин от реального кристалла

Рентгенографическое определение текстур

Аксиальная текстура. Конус положений и конус отражений. Способы определения индексов оси аксиальной текстуры

Определение величины и формы крупных кристалликов

Определение величины и формы зерен по величине, форме и числу пятен на линиях дебаеграммы.

Определение величины мелких кристалликов и микродеформаций по эффекту дифракционного размытия

Формула Селякова. Метод аппроксимации. Определение физического уширения методом гармонического анализа. Раздельное определение микродеформаций (микронапряжений) и величины блоков.

Рентгенографическое определение макронапряжений

Раздельное определение главных напряжений. Методика рентгеносьевок.

Рентгеноанализ твердых растворов

Определение концентрации и типа твердого раствора. Рентгеноанализ упорядоченных твердых растворов.

Рентгенофазовый анализ

Качественный и количественный фазовый анализ. Методы подмешивания, независимого эталона и гомологических пар.

Рентгеноспектральный анализ твердых тел

Методы рентгеноспектрального анализа

Методы рентгеноспектрального анализа: эмиссионный (по первичным характеристическим спектрам); абсорбционный (по спектрам поглощения); флуоресцентный (по вторичным характеристическим спектрам). Рентгеновские спектрографы и спектрометры.

Качественный и количественный спектральный анализ

Качественный спектральный анализ. Количественный спектральный анализ эмиссионным и флуоресцентным методами. Внутренний и внешний стандарты. Абсорбционный метод количественного рентгеноспектрального анализа.

Характеристика излучений, используемых в ДСА

Нейтроннография

Аппаратура. Счетчики. Особенности атомных амплитуд рассеяния нейтронов. Наиболее существенные области применения нейтроннографии.

Электроннография

Основные принципы. Электроннография и ее применение. Аппаратура. Расчет электронограмм. Применение электронографического метода.

Метод порошков для кристаллов средних сингоний

Дебаграммы, полученные от поликристаллических материалов, принадлежащих гексагональной и тетрагональной сингониям, не могут быть рассчитаны аналитически. Для решения этой задачи используют графические методы, особенности этих методов и реализация их на практике разбирается в данной теме.

Прецизионное определение периодов кристаллической решетки

Метод порошков в обычном варианте и большинстве методов исследования монокристаллов позволяют определить периоды решетки кристаллических веществ с невысокой точностью (погрешность составляет порядка 0.1 %).

В тоже время существует большой, непрерывно расширяющийся круг задач, связанных с изучением твердого тела, для решения которых нужно предельно точное определение периодов решетки. К числу таких задач относятся, например, изучение природы межатомной связи в твердых телах, характеристик твердых растворов, влияние облучения на материалы, остаточных внутренних напряжений, плотности и

коэффициентов термического расширения (в случаях, когда обычные методы неприменимы).
Высокой точности определения периодов (погрешность 0.01 - 0.001 %) достигают применением особых методов съемки и обработки результатов измерения рентгенограмм, называемых прецизионными методами.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Семенова О. Р. Дополнительные главы дифракционного структурного анализа. учебное пособие Ч. 2/О. Р. Семенова ; Пермский государственный национальный исследовательский университет, Министерство образования и науки Российской Федерации.-Пермь,2012, ISBN 978-5-7944-1711-1.-169.-Библиогр.: с. 163-164
2. Илюшин, А. С. Дифракционный структурный анализ в 2 ч. Часть 1 : учебное пособие для вузов / А. С. Илюшин, А. П. Орешко. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 327 с. — (Авторский учебник). — ISBN 978-5-534-04316-7. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/438402>
3. Рентгеноструктурный анализ веществ : методические указания к лабораторной работе / И. А. Коваленко, С. В. Бахтин, И. В. Богомолов, Е. В. Кузнецова. — Липецк : Липецкий государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2010. — 24 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/22926>
4. Малинина Л. Н. Дифракционный структурный анализ: учебное пособие для студентов физического факультета, обучающихся по специальности "Физика конденсированного состояния вещества"/Л. Н. Малинина.-Пермь,2011, ISBN 978-5-7944-1622-0.-247.-Библиогр.: с. 239
5. Семенова О. Р. Дополнительные главы дифракционного структурного анализа. учебное пособие для студентов физического факультета, обучающихся по специальности "Физика конденсированного состояния вещества" Ч. 1/О. Р. Семенова ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Пермский государственный университет.-Пермь,2010, ISBN 978-5-7944-1490-5.-185.-Библиогр.: с. 179
6. Илюшин, А. С. Дифракционный структурный анализ в 2 ч. Часть 2 : учебное пособие для вузов / А. С. Илюшин, А. П. Орешко. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 299 с. — (Авторский учебник). — ISBN 978-5-534-04324-2. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/438750>
7. Семенова О. Р. Рентгенографическое исследование тонкой структуры твердых тел: учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки бакалавров "Нанотехнологии и микросистемная техника"/О. Р. Семенова.-Пермь:Пермский государственный национальный исследовательский университет,2018, ISBN 978-5-7944-3093-6.-1.-Библиогр.: с. 93 <https://elis.psu.ru/node/508261>

Дополнительная:

1. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ/А. И. Китайгородский.- Ленинград:Гостехиздат,1950.-652.
2. Русаков А. А. Рентгенография металлов: учебник для студентов по специальности "Физика металлов"/А. А. Русаков.-Москва:Атомиздат,1977.-479.-Библиогр.: с. 468-470. - Предм. указ.: с. 471-475
3. Уманский Я. С. Рентгенография металлов: учебник для студентов вузов, обучающихся по специальностям "Физико-химические исследования металлургических процессов" и "Физика металлов"/Я. С. Уманский.-Москва:Металлургия,1967.-235.-Библиогр.: с. 230-235

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://www.iprbookshop.ru/56579.html> Рентгенографические, электронно-микроскопические и дериватографические методы исследования сверхтвердых материалов. Практикум

<http://www.iprbookshop.ru/22926> Рентгеноструктурный анализ веществ: Методические указания к лабораторной работе

<http://www.iprbookshop.ru/47135.html> Современные методы структурного анализа веществ

<http://www.iprbookshop.ru/74087.html> Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения

<http://www.iprbookshop.ru/20072> Дифракционный анализ

<http://www.iprbookshop.ru/47135.html> Современные методы структурного анализа веществ

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Дифракционный структурный анализ** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС) ;
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения:

1. Операционная система "ALT Linux".
2. Приложение позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов «Adobe Acrobat Reader DC».
3. Программы, демонстрации видео материалов (проигрыватель) «WindowsMediaPlayer».
4. Программа просмотра интернет контента (браузер) «Google Chrome» или аналогичных.
5. Офисный пакет приложений «LibreOffice».

При освоении материала и выполнении заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.

Лабораторные занятия проходят в Лаборатории рентгеноструктурного анализа, оснащенной специализированным оборудованием. Состав оборудования определен в Паспорте лаборатории.

Групповые (индивидуальные) консультации проводятся в аудитории, оснащенной меловой (и) или

маркерной доской.

Текущий контроль осуществляется в аудитории, оснащенной меловой (и) или маркерной доской.

К помещениям для самостоятельной работы студентов относятся:

- Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.
- Помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Дифракционный структурный анализ**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.1

Способен исследовать и контролировать структуру вещества на атомно-молекулярном уровне с помощью различных инструментальных методов

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - рабочие формулы интегральной интенсивности дифракционных линий; - влияние случайных неправильностей кристаллической решетки на трансформацию селективных максимумов дифракционной картины; - методы определения радиального распределения атомной плотности в аморфных системах; - основные методы определения размеров наночастиц в поликристаллах. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретически рассчитать интегральную интенсивность реального кристалла; - применять методы рентгеноспектрального анализа для определения фазового анализа кристаллических веществ; - определять структуру аморфного сплава; -рассчитывать межатомную функцию (функцию Паттерсона) для любой структуры. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами прецизионного 	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Студент не знает рабочие формулы интегральной интенсивности дифракционных линий; не знаком с теорией о влиянии случайных неправильностей кристаллической решетки на трансформацию селективных максимумов дифракционной картины; не знаком с методами определения радиального распределения атомной плотности в аморфных системах, а также с основными методами определения размеров наночастиц в поликристаллах.</p> <p>Студент не умеет теоретически рассчитывать интегральную интенсивность реального кристалла, применять методы рентгеноспектрального анализа для определения фазового анализа кристаллических веществ, определять структуру аморфного сплава, рассчитывать межатомную функцию (функцию Паттерсона) для любой структуры.</p> <p>Студент не владеет методами прецизионного определения параметров кристаллической решетки, методами устранения возможных погрешностей при анализе дифракционных картины от различных кристаллических веществ и методами их обработки и интерпретации полученных результатов.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Студент знает рабочие формулы интегральной интенсивности дифракционных линий; не знаком с теорией</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
	<p>определения параметров кристаллической решетки; - методами устранения возможных погрешностей при анализе дифракционных картины от различных кристаллических веществ, методами их обработки и интерпретации полученных результатов.</p>	<p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> <p>о влиянии случайных неправильностей кристаллической решетки на трансформацию селективных максимумов дифракционной картины; знаком с методами определения радиального распределения атомной плотности в аморфных системах, а также с основными методами определения размеров наночастиц в поликристаллах.</p> <p>Студент умеет теоретически рассчитывать интегральную интенсивность реального кристалла с подсказкой преподавателя, требуется задать наводящие вопросы, применять методы рентгеноспектрального анализа для определения фазового анализа кристаллических веществ, определять структуру аморфного сплава, рассчитывать межатомную функцию (функцию Паттерсона) для любой структуры.</p> <p>Студент плохо владеет методами прецизионного определения параметров кристаллической решетки, методами устранения возможных погрешностей при анализе дифракционных картины от различных кристаллических веществ и методами их обработки и интерпретации полученных результатов, для практической реализации методов требуется помощь преподавателя.</p> <p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>Студент знает рабочие формулы интегральной интенсивности дифракционных линий; знаком с теорией о влиянии случайных неправильностей кристаллической решетки на трансформацию селективных максимумов дифракционной картины; знаком с методами определения радиального распределения атомной плотности в аморфных системах, а также с основными методами определения размеров наночастиц в поликристаллах.</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>Студент умеет теоретически рассчитывать интегральную интенсивность реального кристалла, применять методы рентгеноспектрального анализа для определения фазового анализа кристаллических веществ, определять структуру аморфного сплава, рассчитывать межатомную функцию (функцию Паттерсона) для любой структуры.</p> <p>Студент знаком с методами прецизионного определения параметров кристаллической решетки, методами устранения возможных погрешностей при анализе дифракционных картины от различных кристаллических веществ и методами их обработки и интерпретации полученных результатов, но для их практического применения необходима помощь преподавателя.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Студент знает рабочие формулы интегральной интенсивности дифракционных линий; знаком с теорией о влиянии случайных неправильностей кристаллической решетки на трансформацию селективных максимумов дифракционной картины; знаком с методами определения радиального распределения атомной плотности в аморфных системах, а также с основными методами определения размеров наночастиц в поликристаллах.</p> <p>Студент умеет теоретически рассчитывать интегральную интенсивность реального кристалла, применять методы рентгеноспектрального анализа для определения фазового анализа кристаллических веществ, определять структуру аморфного сплава, рассчитывать межатомную функцию (функцию Паттерсона) для любой структуры.</p> <p>Студент владеет методами прецизионного</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		Отлично определения параметров кристаллической решетки, методами устранения возможных погрешностей при анализе дифракционных картины от различных кристаллических веществ и методами их обработки и интерпретации полученных результатов.

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 45 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 45 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Рассеяние рентгеновских лучей сложной кристаллической решеткой Письменное контрольное мероприятие	Знание структурного фактора для различных кристаллических структур. Знание о методах получения законов погасания дифракционных линий.
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Метод порошков для кристаллов кубической сингоний Письменное контрольное мероприятие	Схема метода. Подбор излучения для получения рентгенограммы в методе Дебая. Расчет параметров кристалла в методе Дебая.
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Определение ориентировки монокристалла методом Лауэ Письменное контрольное мероприятие	Знание о методе Лауэ определения ориентировки монокристаллов. Знание о методе сводной гномостериографической проекции. Знание об определении сингонии кристаллов методом Лауэ.
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Метод вращения Письменное контрольное мероприятие	Схема метода вращения. Получение рентгенограммы вращения. Параметры кристалла определяемые по рентгенограмме вращения.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Факторы интегральной интенсивности Письменное контрольное мероприятие	Знание о факторах интегральной интенсивности. Вывод формул интегральной интенсивности для различных методов ДСА.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Рассеяние рентгеновских лучей сложной кристаллической решеткой

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Структурная амплитуда для типовых решеток кристаллов	11
Закон погасания кристалла с г.п.у. решеткой	9

Метод порошков для кристаллов кубической сингоний

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Расчетные формулы в методе Дебая	7
Расчет рентгеновской плотности материала	5
Рентгеновская флуоресценция	3
Коэффициент поглощения рентгеновских лучей веществом	3
Предельные индексы интерференции в методе порошков	2

Определение ориентировки монокристалла методом Лауэ

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Способ получения и анализ дифракционной картины в методе Лауэ.	11
Схема метода Лауэ. Его геометрическая интерпретация	5
Точки первого и второго рода	3
Вспомогательный инструмент в методе Лауэ	1

Метод вращения

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Расчет рентгенограммы вращения.	9
Условия получения рентгенограмм вращения	5
Определение типа решетки бравэ	3
Особенности расположения рефлексов на слоевых линиях рентгенограммы вращения.	3

Факторы интегральной интенсивности

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Структурный фактор и закон погасания	6
Угловая зависимость факторов интегральной интенсивности	5
Знание о факторах интегральной интенсивности.	5
Законы погасаний для типовых структур кристаллов	4

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Экзамен

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 44 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 44 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Рентгенографическое определение текстур Письменное контрольное мероприятие	Понятие текстуры материала. Рентгенографический метод определения оси аксиальной текстуры ОЦК и ГЦК кристаллов.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Рентгенофазовый анализ Письменное контрольное мероприятие	Знание о методах рентгенофазового анализа. Знания о качественном рентгенофазовом анализе. Знание о количественном рентгенофазовом анализе. Знание о способах повышения чувствительности рентгенофазового анализа.
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Метод порошков для кристаллов средних сингоний Письменное контрольное мероприятие	Методы индирования рентгенограмм в методе Дебая кристаллов разных сингоний.
ПК.1.2 Применяет современные инструментальные методы исследования и контроля строения реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Прецизионное определение периодов кристаллической решетки Письменное контрольное мероприятие	Знание о методах получения дифракционных картин для прецизионного определения параметров кристаллической решетки. Знание о погрешностях и путях их устранения. Выбор излучения при проведении эксперимента.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Рентгенографическое определение текстур

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Понятие "текстура" в поликристалле.	11
Методы определения ориентации оси аксиальной текстуры.	7
Связь дифракционной картины и ориентации кристаллитов в материале с текстурой.	7

Рентгенофазовый анализ

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Знание о методах рентгенофазового анализа.	11
Знание о способах повышения чувствительности рентгенофазового анализа.	11

Способы приготовления образцов для фазового рентгеноанализа	3
---	---

Метод порошков для кристаллов средних сингоний

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Методы расчета порошковых рентгенограмм некубических кристаллов	7
Уравнение Вульфа-Брэгга	7
Кривые Хелла-Деви и Бьернстрема	7
Функция атомного рассеяния	4

Прецизионное определение периодов кристаллической решетки

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Выбор условий эксперимента для проведения прецизионного определения параметров кристаллической решетки.	11
Знание о погрешностях и путях их устранения.	5
Факторы влияющие на вид дифракционных линий	5
Выбор экстраполяционной функции.	4