

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования_
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол № 6 от 31.05.2023 г.

Рабочая программа дисциплины

Рентгенография кристаллов

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Направление подготовки / специальность

03.03.02 - Физика

Направленность образовательной программы

Физика конденсированного состояния

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.1.ДВ.03.02 Рентгенография кристаллов относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
<i>ПК-3: Способен проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта</i>	<i>ПК-3.1: Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований кристаллических материалов рентгеновскими методами</i>	<i>ПК-3.1: Знать основы физики рентгеновских лучей, теоретические основы кинематической теории дифракции рентгеновских лучей, методы генерации рентгеновского излучения, основные методы проведения рентгенодифракционных экспериментов. Уметь проводить подготовку образцов для рентгенодифракционных экспериментов, интерпретировать полученные результаты рентгенодифракционных экспериментов, определять симметрию кристалла, параметры элементарной ячейки, исследовать монокристаллы методами РСА. Владеть подготовкой образцов для съемки на порошковом дифрактометре, подготовка монокристалльных образцов для РСА, получение сферических монокристалльных образцов, индифференцирование простых порошковых дифрактограмм, определение параметров элементарной ячейки кубических кристаллов по порошковым</i>	<i>Задачи Отчет по лабораторным работам</i>	<i>Экзамен: Контрольные вопросы</i>

		дифрактограммам, определение пространственной симметрии кристалла по данным РСА, поиск и уточнение модели кристалла по данным РСА.		
--	--	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	10
Часов по учебному плану	360
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	42
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	132
- КСР	4
самостоятельная работа	101
Промежуточная аттестация	81 экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/ лабора- торные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
ОСНОВЫ ФИЗИКИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	39	5	18	23	16
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ С ВЕЩЕСТВОМ	25	5	10	15	10
КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ	39	8	16	24	15
ОСНОВНЫЕ СХЕМЫ УСТРОЙСТВА ДИФРАКТОМЕТРОВ	6	2	2	4	2
МЕТОДЫ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ	75	10	40	50	25
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ МОНОКРИСТАЛЛОВ	75	10	40	50	25
ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, ПРИМЕНЯЕМОЕ В СОВРЕМЕННОМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ	16	2	6	8	8
Аттестация	81				
КСР	4				4

Итого	360	42	132	178	101
-------	-----	----	-----	-----	-----

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Рентгенография кристаллов" (<https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3903>).

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-3

1. Индицировать порошковую дифрактограмму, предложенную преподавателем. Определить тип решетки Браве, межплоскостные расстояния наиболее сильных рефлексов, параметры элементарной ячейки.
2. Используя справочный материал идентифицировать порошковую дифрактограмму, предложенную преподавателем.
3. По заданию преподавателя выполнить количественный фазовый анализ, предложенной порошковой дифрактограммы. Метод анализа выбирает преподаватель.
4. Определить пространственную группу симметрии кристалла по рентгеноструктурному эксперименту предложенному преподавателем.
5. Рассчитать заряд модельной ячейки кристалла.
6. Рассчитать баланс валентных усилий модельного кристалла.
7. Вычислить рентгеновскую плотность кристалла.
8. Рассчитать молярную массу формульной единицы заданного кристалла.
9. Вычислить коэффициент линейного поглощения для заданного кристалла и заданной длины волны.
10. Определить погасания для указанной преподавателем группы пространственной симметрии кристалла.

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Успешное выполнение практических заданий, выданных преподавателем, владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить точки активного роста нового знания.
не зачтено	Невыполнение практических заданий, выданных преподавателем, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации.

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Отчет по лабораторным работам) для оценки сформированности компетенции ПК-3

1. Лабораторный практикум по методам порошковой дифракции.
2. Лабораторный практикум по методам монокристалльного рентгеноструктурного анализа.

Критерии оценивания (оценочное средство - Отчет по лабораторным работам)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Успешное выполнение практических заданий, выданных преподавателем, владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить точки активного роста нового знания.
не зачтено	Невыполнение практических заданий, выданных преподавателем, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации.

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели	Имеется минимальный набор навыков для решения	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартны	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартны	Продemonстрированы навыки при решении нестандарт	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартны

	вследствие отказа обучающегося от ответа	место грубые ошибки	стандартны х задач с некоторым и недочетами	х задач с некоторым и недочетами	х задач без ошибок и недочетов	ных задач без ошибок и недочетов	х задач
--	--	---------------------	---	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	---------

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации

5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

Оценочное средство - Контрольные вопросы

Экзамен

Критерии оценивания (Контрольные вопросы - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Исчерпывающее владение программным материалом, глубокое понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, твёрдое знание основных положений дисциплины, умение применять концептуальный аппарат при анализе актуальных проблем. Логически последовательные, содержательные, конкретные ответы на все вопросы экзаменационного билета и на дополнительные вопросы, свободное владение источниками. Практическая часть курса успешно выполнена.
отлично	Исчерпывающее владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, твёрдое знание основных положений дисциплины, умение применять концептуальный аппарат при анализе актуальных проблем. Логически последовательные, содержательные, конкретные ответы на все вопросы экзаменационного билета и на дополнительные вопросы, свободное владение источниками. Практическая часть курса успешно выполнена.

Оценка	Критерии оценивания
очень хорошо	Достаточно полные знания программного материала, правильное понимание сути вопросов, знание определений, умение формулировать тезисы и аргументы. Ответы последовательные и в целом правильные, хотя допускаются незначительные неточности, не достаточно глубокое знакомство с отдельными теориями и фактами, достаточно формальное отношение к рекомендованным для подготовки материалам. Практическая часть курса успешно выполнена.
хорошо	Достаточно полные знания программного материала, правильное понимание сути вопросов, знание определений, умение формулировать тезисы и аргументы. Ответы последовательные и в целом правильные, хотя допускаются неточности, поверхностное знакомство с отдельными теориями и фактами, достаточно формальное отношение к рекомендованным для подготовки материалам. Практическая часть курса успешно выполнена.
удовлетворительно	фрагментарные знания, расплывчатые представления о предмете. Ответ содержит как правильные утверждения, так и ошибки, возможно, грубые. Испытуемый плохо ориентируется в учебном материале, не может устранить неточности в своем ответе даже после наводящих вопросов. Практическая часть курса успешно выполнена.
неудовлетворительно	Отсутствие ответа хотя бы на один из основных вопросов, либо грубые ошибки в ответах, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией. Практическая часть курса не выполнена или выполнена не в полном объеме.
плохо	Полное отсутствие ответа хотя бы на один из основных вопросов, либо грубые ошибки в ответах, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией. Практическая часть курса не выполнена.

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ПК-3 (Способен проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта)

1. Метод Дебая - основной метод идентификации вещества. Интерпретация дифракционной картины с помощью обратной решетки. Различные способы получения рентгенограмм от поликристалла. Методы подготовки образцов.
2. Индексировка дебаегрэм в различных сингониях.
3. Прецизионное определение параметров элементарной ячейки (метод Дебая).
4. Качественный фазовый анализ. Справочники, банки данных, PDF-2, PDF-4.
5. Количественный фазовый анализ: Метод градировочной кривой.
6. Количественный фазовый анализ: Метод гомологичных пар.
7. Количественный фазовый анализ: Метод корундовых чисел.
8. Количественный фазовый анализ: Полный анализ многофазной смеси.
9. Количественный фазовый анализ: Анализ n-компонентной системы.
10. Количественный фазовый анализ: Анализ образца с известным массовым коэффициентом поглощения.
11. Количественный фазовый анализ: Метод добавок.
12. Количественный фазовый анализ: Метод разбавления.
13. Анализ остаточных напряжений.
14. Дефекты в кристаллах и их влияние на дифракционную картину.
15. Текстуры. Виды текстур. Вид дифракционной картины от текстур. Интерпретация дифракционных картин от текстур.
16. Способы подготовки образцов для монокристалльного рентгеноструктурного эксперимента.
17. Дифракционный эксперимент. Матрица ориентации. Поиск матрицы ориентации. Сбор дифракционных данных. Сходства и различия в алгоритмах сбора дифракционных данных на приборах с точечными и двухмерными детекторами. Количественные критерии оценки качества полученных дифракционных данных.
18. Определения списка вероятных групп симметрии кристалла. Е-статистика.
19. Функция Паттерсона и её свойства.
20. Интерпретация Паттерсоновских синтезов. Метод тяжелого атома.

21. Фазовый инвариант. соотношение Захариазена. Структурные произведения. Нормализованная структурная и единичная структурные амплитуда.
22. Равенство Сайра. Неравенство Харкера и Каспера.
23. Распределение структурных амплитуд в тройках структурных произведений в центросимметричных кристаллах.
24. Функции распределения фазовых инвариантов в нецентросимметричных кристаллах.
25. Определение фаз для центросимметричных кристаллов (прямые методы).
26. Определение начальных фаз в случае нецентросимметричных кристаллов (прямые методы).
27. Алгоритм поиска первоначального фрагмента структуры Charge Flipping.
28. Поиск модели кристалла с помощью разностного синтеза электронной плотности. Критерии достоверности найденной модели кристалла.
29. Уточнение параметров структуры методом МНК.
30. Программный комплекс SHELX.
31. Принципы организации CIF-файлов.
32. Определение абсолютной конфигурации структуры при помощи параметра Флака.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия : учеб. для вузов по специальности "Физика металлов" и "Металловедение, оборудование и технология термической обработки металлов". - М. : Металлургия, 1982. - 631 с. : ил. - 1.40., 20 экз.
2. Хейкер Даниэль Моисеевич. Рентгеновская дифрактометрия / под ред. Г. С. Жданова. - М. : Физматгиз, 1963. - 380 с. : ил. - (Физико-математическая библиотека инженера). - 1.10., 2 экз.
3. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов / под ред. В. А. Франк-Каменецкого. - Л. : Недра, Ленингр. отд-ние, 1975. - 399 с. : ил. - 1.53., 2 экз.
4. Бокий Г. Б. Практический курс рентгеноструктурного анализа : [для вузов]. - М. : Изд-во МГУ, 1951. - 431 с. : ил. - 10.80., 2 экз.
5. Порай-Кошиц Михаил Александрович. Основы структурного анализа химических соединений : [учеб. пособие для хим. спец. ун-тов]. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1989. - 191, [1] с. : ил. - ISBN 5-06-000074-5 : 0.40., 2 экз.
6. Порай-Кошиц Михаил Александрович. Практический курс рентгеноструктурного анализа : [для гос. ун-тов]. Т. 2. - М. : Изд-во МГУ, 1960. - 632 с. - 18.15., 4 экз.
7. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика / пер. с фр. Е. Н. Беловой [и др.] ; под ред. Н. В. Белова. - М. : Физматгиз, 1961. - 604 с. : ил. - 2.65., 7 экз.

Дополнительная литература:

1. Миркин Лев Иосифович. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов : справ. руководство : получение и измерение рентгенограмм / под ред. Я. С. Уманского. - М. : Физматгиз, 1961. - 863 с. : ил. - 3.56., 5 экз.
2. Нуссбаумер Генри. Быстрое преобразование Фурье и алгоритмы вычисления сверток / пер. с англ. Ю. Ф. Касимова, И. П. Пчелинцева ; под ред. В. М. Амербаева, Т. Э. Кренкеля. - М. : Радио и связь, 1985. - 248 с. : схем. - 1.10., 2 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

1. <http://iucr.org>
2. <http://it.iucr.org>

3. <http://checkcif.iucr.org/>
4. <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/>
5. <http://www-xray.fzu.cz/jana/jana.html>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, специализированным оборудованием: Порошковый рентгеновский дифрактометр Simadzu XRD7000. Монокристалльные автоматические дифрактометры Oxford Diffraction Gemini S и Rigaku XTaLab P200 MM003.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 03.03.02 - Физика.

Автор(ы): Сомов Николай Викторович, доктор физико-математических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Чупрунов Евгений Владимирович, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 20.05.2022, протокол № б/н.