

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 № 15 от 24.12.2025 г.

Рабочая программа дисциплины

Рентгенография материалов

Уровень высшего образования
Бакалавриат

Направление подготовки / специальность
03.03.02 - Физика

Направленность образовательной программы
Физика конденсированного состояния

Форма обучения
очная

г. Нижний Новгород

2026 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.1.11 Рентгенография материалов 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
ПК-3: Способен проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ИД ПК-3: Демонстрация способности проводить научные исследования с помощью современной приборной базы, сложного физического оборудования и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ИД ПК-3: Знать: Основы физики рентгеновских лучей, теоретические основы кинематической теории дифракции рентгеновских лучей, методы генерации рентгеновского излучения, основные методы проведения рентгенодифракционных экспериментов. Методы верификации рентгенодифракционных структурных данных, принципы работы баз данных порошковой дифракции, принципы работы баз данных монокристалльных данных РСА. Уметь: Проводить подготовку образцов для рентгенодифракционных экспериментов, интерпретировать полученные результаты рентгенодифракционных экспериментов, определять симметрию кристалла, параметры элементарной ячейки, исследовать монокристаллы методами РСА. Интерпретировать, опубликованные результаты порошковой дифракции и данные монокристалльных	Отчет по лабораторным работам	Зачёт: Отчет по лабораторным работам Экзамен: Контрольные вопросы

		исследований РСА, проводить оценку степени достоверности данных порошковой дифракции и данные монокристалльных исследований, полученных из разных источников. Владеть: Методами подготовки образцов для съемки на порошковом дифрактометре, подготовкой монокристалльных образцов для РСА, методами получения сферических монокристалльных образцов, методами индицирования порошковых дифрактограмм, методами определения параметров элементарной ячейки кубических кристаллов по порошковым дифрактограммам, методам определение пространственной симметрии кристалла по данным РСА, методами поиска и уточнения моделей кристаллов по данным РСА, подготовкой CIF-файлов. Навыками работы с программным обеспечением современных автоматических дифрактометров, навыками работы в программных комплексах для обработки данных порошковой дифракции и результатов монокристалльных исследований, поиском данных в базах порошковой дифракции PDF, поиском информации в базах данных органических и неорганических монокристаллов CCDC и ICSD.		
--	--	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
--	-------

Общая трудоемкость, з.е.	7
Часов по учебному плану	252
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	42
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	158
- КСР	3
самостоятельная работа	13
Промежуточная аттестация	36
	Экзамен, Зачёт

3.2. Содержание дисциплины

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

Наименование 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	24	5	18	23	1
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ С ВЕЩЕСТВОМ	17	5	10	15	2
КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ	26	8	16	24	2
ОСНОВНЫЕ СХЕМЫ УСТРОЙСТВА ДИФРАКТОМЕТРОВ	8	2	4	6	2
МЕТОДЫ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ	56	10	44	54	2
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ МОНОКРИСТАЛЛОВ	72	10	60	70	2
ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, ПРИМЕНЯЕМОЕ В СОВРЕМЕННОМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ	10	2	6	8	2
Аттестация	36				
КСР	3			3	
Итого	252	42	158	203	13

Содержание разделов и тем дисциплины

1. ОСНОВЫ ФИЗИКИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ. Природа и основные физические свойства рентгеновских лучей. Величины, характеризующие рентгеновское излучение: длина волны, интенсивность. Непрерывный спектр: теория возникновения, коротковолновая граница, распределение интенсивности, зависимость от тока и напряжения на трубке, от металла анода. Характеристический спектр: теория возникновения, закономерности линейчатого спектра, закон Мозли. Источники рентгеновских лучей: рентгеновские трубки, рентгеновских аппарат, основные элементы их

конструкции, синхротронное излучение.

2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ С ВЕЩЕСТВОМ. Ослабление лучей при прохождении через вещество. Поглощение как фотоэлектрический эффект. Флуоресцентное излучение. Когерентное и некогерентное рассеяние. Закон ослабления. Спектр поглощения. Природа скачков поглощения. Фильтры для рентгеновского излучения. Способы регистрации и измерения рентгеновских лучей. Физиологическое действие рентгеновских лучей на организм человека. Защита от рентгеновского излучения.

3. КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ. Интерференция волн. Понятие о дифракции в кристалле. Допущения, принимаемые при рассмотрении геометрического аспекта. Дифракционный эффект, создаваемый решеткой одинаковых атомов. Условия Лауэ. Дифракция как отражение от плоскостей. Формула Вульфа-Брэгга. Дифракция в сложной структуре. Интерференционное уравнение и сфера отражения. Методы получения дифракционной картины. Дифракционная симметрия. Закон Фриделя. Дифракционные погасания, вызванные центрированными решетками Бравэ, винтовыми осями, плоскостями скользящего отражения. Рентгеновская дифракционная группа. Рассеяние рентгеновских лучей электроном. Поляризационный фактор. Рассеяние атомом. Функция атомного рассеяния. Рассеяние группой атомов. Структурная амплитуда, структурный фактор. Влияние симметрии на вид формул структурной амплитуды. Законы погасания рефлексов. Определение симметрии кристаллов по дифракционным картинам. Дифракция в идеальном малом кристалле. Рассеяние рентгеновских лучей реальным кристаллом. Температурный фактор и вывод тепловой поправки. Интерференционная функция и интерференционный фактор. Протяженность и форма узлов обратной решетки. Интегральная интенсивность. Фактор Лоренца. Фактор поглощения. Первичная и вторичная экстинкция. Методы учета экстинкции. Фактор повторяемости. Диффузное рассеяние. Фурье-преобразование. Применение рядов Фурье в РСА. Принципы быстрого преобразования Фурье. Разложение электронной плотности в ряд Фурье. Упрощение расчета электронной плотности с учетом симметрии кристалла.

4. ОСНОВНЫЕ СХЕМЫ УСТРОЙСТВА ДИФРАКТОМЕТРОВ. Область применения. Детекторы, применяемые в рентгеновской дифрактометрии и их основные характеристики. Монохроматизация излучения. Дифрактометры. Графическая модель исследования дифракционной картины. Системы координат в обратном пространстве. Расчет установочных углов. Уточнение параметров элементарной ячейки. Измерение интегральной интенсивности. Учет фона. Получение структурных факторов. Точность определения интегральных интенсивностей и структурных факторов. Автоматизация исследования структуры монокристаллов. Условие дифракции и его интерпретация с помощью обратной решетки и сферы отражения. Получение рентгенограмм. Закономерности дифракционной картины: зональные кривые, важные узловые ряды и сетки. Симметрия лауэграмм. Определение точечной дифракционной симметрии кристалла по лауэграммам. Гномостереографическая проекция. Построение и анализ сводной стереографической проекции. Определение ориентации кристалла. Юстировка кристалла по лауэграммам. Методы вращения и качания. Обратная решетка и расположение пятен на рентгенограмме вращения. Получение рентгенограмм вращения. Определение периода идентичности вдоль оси вращения.

5. МЕТОДЫ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ. Метод Дебая - основной метод идентификации вещества. Интерпретация дифракционной картины с помощью обратной решетки. Различные способы получения рентгенограмм от поликристалла. Методы подготовки образцов. Индексировка дебаеграмм в различных сингониях. Прецизионное определение параметров элементарной ячейки. Прецизионные измерения межплоскостных расстояний. Качественный фазовый анализ. Количественный фазовый анализ. Метод градировочной кривой. Метод внутреннего эталона. Метод гомологичных пар. Метод корундовых чисел. Полный анализ многофазной смеси. Анализ n-компонентной системы. Анализ образца с

известным МКП. Метод добавок. Метод разбавления. Чувствительность метода порока. Справочники, банки данных, PDF-2, PDF-4. Анализ остаточных напряжений. Анализ размера и числа кристаллитов в поликристаллах. Дефекты в кристаллах и их влияние на дифракционную картину.

6. РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ МОНОКРИСТАЛЛОВ. Проблема определения атомной структуры кристалла по дифракционной картине. Этапы установления атомной структуры кристалла. Анализ проблем каждого этапа и методы решения этих проблем.

11. ПОДГОТОВКА ОБРАЗЦОВ ДЛЯ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА. Методики подготовки образцов для рентгеновского эксперимента. Отбор кристаллов. Наклеивание кристаллов. Методы получения сферических образцов. Подготовка образцов для съемки при низкой и высокой температуре. Общие рекомендации по приборам, материалам и методике подготовки образцов. Системы координат кристалла и дифрактометра. Матрица ориентации кристалла (UB). Автоматические методы поиска элементарной ячейки. Метод поиска ячейки по трем индизированным рефлексам. Метод поиска ячейки по гномостереографической проекции обратного пространства. Анализ обратного пространства. Е-статистика. Определение пространственной группы симметрии кристалла. Компьютерные программы для анализа обратного пространства (RED, Platon и др.). Функция Паттерсона. Свойства функции Паттерсона. Анализ функции Паттерсона для кристаллов с различной симметрией. Метод «тяжёлого» атома. Прямые методы. Неравенства Харкера-Каспера. Структурный инвариант. Равенство Сейра. Тангенс формула. Основы метода Charge Flipping. Уточнение модели атомной структуры кристалла. Метод наименьших квадратов. Весовые схемы. Ограничения на вариацию некоторых параметров структуры. Разностный синтез электронной плотности. Анализ разностного синтеза электронной плотности. Выявление энантиоморфных модификаций. Параметр Флэйка. Электронейтральность и расчет баланса валентных усилий. Анализ электронной плотности.

7. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРИМЕНЯЕМОЕ В СОВРЕМЕННОМ

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ. Программное обеспечение современных автоматических дифрактометров: Shimadzu, Oxford Diffraction, Rigaku и др. Описание программного обеспечения для обработки рентгенодифракционных данных, решению и уточнению атомных структур. Комплексы Shelx, WinGX, Jana и др. Средства визуализации атомных структур кристаллов: Mercury, VESTA и др. Программное обеспечение баз данных монокристалльного PCA CCDC и ICSD, а также онлайн сервисы. Критерии правильности выполнения расшифровки атомной структуры кристалла. Автоматизированный тест Международного Союза Кристаллографов (IUCR) рентгеноструктурной информации (Platon). Форма регистрации результатов расшифровки кристалла. CIF – Crystal Information File синтаксис, структура, правила заполнения, программы для работы. Оформление изображений атомных структур кристаллов. Оформление таблиц с наиболее важными рентгеноструктурными данными. Кристаллохимическое описание атомных структур кристаллов.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

Электронные курсы, созданные в системе электронного обучения ННГУ:

Рентгенография кристаллов, <https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3903>.

Иные учебно-методические материалы:

1. Сомов Н.В., Чупрунов Е.В. Моделирование дифракции рентгеновских лучей на поликристаллических материалах. / Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2024. 69 с.
2. Сомов Н.В. Качественный рентгенофазовый анализ поликристаллических материалов. Практикум. - Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2018. 17 с.
3. Сомов Н.В. Рентгеноструктурный анализ монокристаллов. Практикум. - Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2019. 59 с.
4. Сомов Н.В. Псевдосимметрия кристаллов. / Учебное пособие / Под редакцией проф. Е.В. Чупрунова. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2014. 62 с.

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 - Отчет по лабораторным работам) для оценки сформированности компетенции ПК-3:

1. Лабораторный практикум по методам порошковой дифракции.
 - 1.1 Расчет порошковой дифрактограммы
 - 1.2 Индицирование порошковой дифрактограммы
 - 1.3 Качественный рентгенофазовый анализ
 - 1.4 Количественный рентгенофазовый анализ
2. Лабораторный практикум по методам монокристалльного рентгеноструктурного анализа.
 - 2.1 Пробоподготовка для монокристалльного рентгеноструктурного анализа
 - 2.2 Рентгеноструктурный эксперимент на автоматическом рентгеновском дифрактометре
 - 2.3 Определение пространственной группы симметрии кристалла
 - 2.4 Поиск начального фрагмента атомной структуры кристалла методом "тяжелого" атома
 - 2.5 Поиск и уточнение параметров модели атомной структуры кристалла

Критерии оценивания (оценочное средство - Отчет по лабораторным работам)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Лабораторная работа выполнена в полном объеме
не зачтено	Лабораторная работа не выполнена или выполнена не в полном объеме

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	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продемонстрированы 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 вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных 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 с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 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	Все лабораторные работы выполнены в полном объеме
не зачтено	Лабораторные работы выполнены не в полном объеме

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-3

1. Природа и основные физические свойства рентгеновских лучей. Величины, характеризующие рентгеновское излучение: длина волны, интенсивность.
2. Непрерывный спектр рентгеновской трубки. Теория возникновения, коротковолновая граница, распределение интенсивности, зависимость от тока и напряжения на трубке, от металла анода.
3. Характеристический спектр рентгеновского излучения: теория возникновения, закономерности линейчатого спектра, закон Мозли.

4. Источники рентгеновских лучей. Основные элементы их конструкции (рентгеновские трубки, синхротроны).
5. Поглощение рентгеновского излучения веществом. Закон ослабления. Спектр поглощения рентгеновского излучения. Природа скачков поглощения. Фильтры для рентгеновского излучения.
6. Ионизирующее излучение и единицы его измерения. Физиологическое действие рентгеновских лучей на организм человека. Защита от рентгеновского излучения.
7. Интерференция волн. Дифракционный эффект, создаваемый решёткой одинаковых атомов. Условия Лауэ.
8. Дифракция как отражение от атомных плоскостей кристалла. Формула Вульфа-Брэгга. Дифракция в сложной кристаллической структуре.
9. Интерференционное уравнение и сфера отражения. Методы получения дифракционной картины.
10. Рассеяние рентгеновских лучей электроном. Поляризационный фактор.
11. Рассеяние рентгеновских лучей атомом. Функция атомного рассеяния.
12. Структурная амплитуда и ее свойства. Влияние симметрии кристалла на вид формул структурной амплитуды.
13. Дифракционная симметрия. Закон Фриделя. Дифракционные погасания, вызванные центрированными решётками Бравэ, винтовыми осями, плоскостями скользящего отражения. Рентгеновская дифракционная группа. Определение симметрии кристалла по дифракционной картине.
14. Дифракция в идеальном малом кристалле. Протяжённость и форма узлов обратной решётки.
15. Рассеяние рентгеновских лучей реальным кристаллом. Температурный фактор и вывод тепловых поправок.
16. Интегральная интенсивность. Фактор Лоренца. Фактор поглощения. Фактор повторяемости.
17. Первичная и вторичная экстинкция. Методы учёта экстинкции.
18. Фурье-преобразование. Разложение электронной плотности в ряд Фурье. Интегральная структурная амплитуда.
19. Детекторы рентгеновского излучения, применяемые в рентгеновской дифрактометрии и их основные характеристики.
20. Монохроматизация, фильтрация и коллимация рентгеновского излучения.
21. Основные схемы современных дифрактометров. Виды съёмки.
22. Метод Лауэ. Условие дифракции и его интерпретация с помощью обратной решетки и сферы отражения. Получение рентгенограмм. Закономерности дифракционной картины: зональные кривые, важные направления, симметрия лауэграмм. Построение и анализ гномостереографической проекции

осей зон плоскостей. Определение точечной дифракционной симметрии кристалла по лауэграммам. Юстировка кристалла по лауэграммам.

23. Методы вращения и качания. Получение рентгенограмм вращения. Обратная решётка и расположение пятен на рентгенограмме вращения. Определение периода идентичности вдоль оси вращения.

24. Метод Дебая. Интерпретация дифракционной картины с помощью обратной решётки. Методы подготовки образцов.

25. Индексирование порошковых дифрактограмм для кристаллов кубической сингонии. Обобщенный подход к индексированию порошковых дифрактограмм.

26. Прецизионное определение параметров элементарной ячейки по порошковой дифрактограмме.

27. Качественный фазовый анализ. Справочники, банки данных, PDF-2, PDF-4.

28. Количественный фазовый анализ: Метод градировочной кривой.

29. Количественный фазовый анализ: Метод гомологичных пар.

30. Количественный фазовый анализ: Метод корундовых чисел.

31. Количественный фазовый анализ: Полный анализ многофазной смеси.

32. Количественный фазовый анализ: Анализ n-компонентной системы.

33. Количественный фазовый анализ: Анализ образца с известным массовым коэффициентом поглощения.

34. Количественный фазовый анализ: Метод добавок.

35. Количественный фазовый анализ: Метод разбавления.

36. Анализ остаточных напряжений.

37. Дефекты в кристаллах и их влияние на дифракционную картину.

38. Текстуры. Виды текстур. Вид дифракционной картины от текстур. Интерпретация дифракционных картин от текстуры.

39. Способы подготовки образцов для монокристалльного рентгеноструктурного эксперимента.

40. Дифракционный эксперимент. Матрица ориентации. Поиск матрицы ориентации. Сбор дифракционных данных. Особенности алгоритмов сбора дифракционных данных на приборах с точечными и двухмерными детекторами. Количественные критерии оценки качества полученных дифракционных данных.

41. Определение списка вероятных групп симметрии кристалла. E-статистика.

42. Функция Паттерсона и её свойства.

43. Интерпретация Паттерсоновских синтезов. Метод тяжелого атома.
44. Фазовый инвариант, соотношение Захариазена. Структурные произведения. Нормализованная структурная и единичная структурные амплитуда.
45. Равенство Сайра. Неравенство Харкера и Каспера.
46. Распределение структурных амплитуд в тройках структурных произведений в центросимметричных кристаллах.
47. Функции распределения фазовых инвариантов в нецентросимметричных кристаллах.
48. Определение фаз для центросимметричных кристаллов (прямые методы).
49. Определение начальных фаз в случае нецентросимметричных кристаллов (прямые методы).
50. Алгоритм поиска первичного фрагмента структуры Charge Flipping.
51. Поиск модели атомной структуры кристалла с помощью разностного синтеза электронной плотности. Критерии достоверности найденной модели кристалла.
52. Уточнение параметров атомной структуры кристалла методом МНК.
53. Программный комплекс SHELX.
54. Определение абсолютной конфигурации структуры при помощи параметра Флэка.
55. Принципы организации CIF-файлов.

Дополнительные вопросы:

1. Какой материал используется в качестве фильтра β -линии на трубках с медным анодом?
2. Условия наблюдения дифракции от кристалла?
3. Какие факторы влияют на интенсивность и ширину дифракционного максимума?
4. Определить дифракционную симметрию кристалла с указанной преподавателем группой пространственной симметрии кристалла
5. Вывести формулы структурной амплитуды для указанной преподавателем группы пространственной симметрии кристалла.
6. Определить погасания для указанной преподавателем группы пространственной симметрии кристалла.
7. Определить симметрию лауэграммы для заданного кристалла и заданной ориентации.
8. Индексировать порошковую дифрактограмму. Определить тип решетки, межплоскостные расстояния.
9. Идентифицировать порошковую дифрактограмму.

10. Выполнить количественный фазовый анализ предложенной порошковой дифрактограммы.
11. Определить пространственную группу симметрии кристалла по рентгеноструктурному эксперименту.
12. Рассчитать заряд модельной ячейки кристалла.
13. Рассчитать баланс валентных усилий валентного кристалла.
14. Вычислить рентгеновскую плотность кристалла.
15. Вычислить коэффициент линейного поглощения для заданного кристалла и заданной длины волны.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
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»
неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

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 подготовки/специальности 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 23.12.2025, протокол № б/н.