

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Б1.В.12 СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Направление подготовки (специальность) 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Профиль подготовки (специализация)

Форма обучения очная

Год набора 2024

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Программу составили  
доцент, к.ф.-м.н. Молокеев М.С.

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины:

Приобретение студентами знаний о методах исследования строения кристаллических объектов через анализ картины рассеяния исследуемым объектом волн разного типа.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины:

Получение студентом знаний и навыков в одном из важнейших разделов кристаллографии.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы высшего образования:

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ПК-2 Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях	
ПК-2.1 Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	знает симметрию кристаллов, дифракционные эффекты взаимодействия твёрдого тела с излучением
ПК-2.2 Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	владеет методами исследования строения кристаллических объектов через анализ картины рассеяния исследуемым объектом волн разного типа

Дисциплина реализуется без применения ЭО и ДОТ

## 2 Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр
		9
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	2 (72)	2 (72)
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	1,5 (54)	1,5 (54)
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
<b>Самостоятельная работа обучающихся</b>	0,5 (18)	0,5 (18)
<b>Вид промежуточной аттестации (Зачет)</b>		Зачёт

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

№ п/п	Вид работ	Темы занятия	Объем часов	Семестр /курс	Часы в эл. формате
<b>Раздел 1. Симметрия кристаллов. Дифракционные эффекты взаимодействия твёрдого тела с излучением</b>					
1.	Лек	Симметрия кристаллов Понятие симметрического преобразования и элемента симметрии. Группа преобразований. Взаимодействие преобразований. Симметрия фигуры. Описание симметрии фигуры с помощью группы симметрии. Вывод групп, описывающих внешнюю форму кристаллов. Классы, виды симметрии, точечные группы. Кристаллическая решётка и способы её описания. Выбор элементарного параллелепипеда. Правила Браве. Симметрия решётки и кристалла. Взаимодействие операций симметрии точечных групп с трансляциями. Пространственные группы, способы их обозначения: интернациональные, Шёнфлиса, Холла. Графическое представление групп. Связь симметрии кристалла с его свойствами	8	9	
2.	Лек	Аппаратура, методы регистрации и предварительного анализа дифракционной картины. Природа рентгеновских волн и их место в ряду электромагнитных волн. Биологическое действие коротковолнового излучения, меры предосторожности. Рентгеновская трубка. Спектр излучения, характеристические линии. Синхротронное излучение и его источники. Виглеры и ондуляторы - преобразование спектра. Фильтры и монохроматоры. Точечные, линейные и двухкоординатные детекторы разного вида. Фотометод. Иные источники рентгеновского излучения. Рассеяние рентгеновских волн на объектах разных типов. Геометрия рассеяния. Дифракционный эффект, дифракционные максимумы, дифракция как отражение. Поглощение. EXAFS- спектроскопия. Обратная решётка и обратное изображение. Координаты точек обратного изображения. Сфера Эвальда. Интерференционное уравнение. Регистрация дифракционной картины с помощью камер (РКОП, прецессионная). Порошковые рентгенограммы. Фазовый анализ. Степень кристалличности и размер кристаллитов.	10	9	
3.	Пр	Симметрические преобразования, формы записи преобразований.	4	9	
4.	Пр	Определение симметрии атомных группировок.	4	9	
5.	Пр	Интерпретация рентгенограмм от порошковых образцов.	6	9	
6.	Ср	Самостоятельная работа	8	9	
<b>Раздел 2. Определение структуры кристалла дифракционными методами</b>					
1.	Лек	Анализ геометрической картины рассеяния. Анализ фотоснимков дифракционной картины. Выделение правил погасания. Лауэвская и дифракционная группы симметрии. Выбор ячейки. Структурная амплитуда. Структурный, поляризационный, кинематический, интерференционный факторы. Фактор интегральности. Связь координат атомов с особенностями дифракционной картины. Фазовая проблема структурного анализа. Тепловой фактор. Изотропное, анизотропное и ангармоническое движение атомов. Экстинкция. Электронная плотность и ряд Фурье.	8	9	
2.	Лек	Решение фазовой проблемы структурного анализа. Структурная амплитуда как случайная величина. Распределение структурных амплитуд в центро- и нецентро- симметричном случаях. Структурные инварианты (триплеты, квартеты и т.д.). Распределение структурных инвариантов. Применение структурных инвариантов к поиску модели структуры. Прямые методы. Функция Паттерсона. Метод функции Паттерсона. Метод изоморфного замещения. Метод аномального рассеяния. Метод наименьших квадратов. Разностные синтезы электронной плотности. Критерии качества уточнения. Метод Ритвельда в порошковой рентгенографии. Взаимодействие пучка электронов с веществом. Приборы для электронографии. Взаимодействие пучка нейтронов с веществом. Магнитное и структурное рассеяние. Стационарные и импульсные ядерные реакторы. Иные источники нейтронов. Тепловые нейтроны. Монохроматоры и детекторы. Задачи, решаемые с помощью рассеяния нейтронов.	10	9	

3.	Пр	Определение дифракционной группы симметрии кристалла по монокристалльным данным.	4	9	
4.	Ср	Самостоятельная работа	10	9	
5.	Зачёт	Зачет		9	

## **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **4.1 Печатные и электронные издания:**

1. Сиб. федерал. ун-т Структурные исследования [Электронный ресурс]:электрон. учеб.-метод. комплекс дисциплины. - Красноярск: ИПК СФУ, 2008. - on-line – Режим доступа: [http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/ELIB\\_DC/UMKD/i-098796.zip](http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/ELIB_DC/UMKD/i-098796.zip) .
2. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия:учебник для вузов по спец. "Геология". - Москва: КДУ, 2010. - 587 с..
3. Кирмасов А. Б. Основы структурного анализа:. - Москва: Научный мир, 2011. - 367 с..
4. Дырдин В. В., Польшгалов Ю. И., Мальшин А. А. Физика твердого тела:учебное пособие. - Кемерово: КузГТУ, 2012. - 108 с..
5. Епифанов Г. И. Физика твердого тела:учебное пособие для вузов. - Санкт-Петербург: Лань, 2011. - 288 с..
6. Мазус М. Д. Структурные исследования неорганических и органических соединений:. - Кишинев: Штиинца, 1985. - 135 с..
7. Дегтяренко Н. Н. Свойства дефектов и их ансамблей, радиационная физика твердого тела [Электронный ресурс]:учебное пособие для вузов. - Москва: НИЯУ МИФИ, 2011. - 200 с. – Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=75892](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=75892) .
8. Александров К. С., Зиненко В. И., Сорокин Б. П., Турчин П. П., Сорокин П. Б., Бурков С. И., Глушков Д. А., Четвергов Н. А., Софронова С. Н., Токарев Н. А. Теоретическая физика твердого тела [Электронный ресурс]:электрон. учеб.-метод. комплекс дисциплины. - Красноярск: СФУ, 2007. - on-line – Режим доступа: [http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/ELIB\\_DC/UMKD/i-656895.zip](http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/ELIB_DC/UMKD/i-656895.zip) .
9. Якимов И. С., Дубинин П. С. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ поликристаллов [Электронный ресурс]:учеб.-метод. пособие для курс. работы [для студентов напр. 150100 «Материаловедение и технология новых материалов»]. - Красноярск: СФУ, 2012. - – Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-551249.pdf> .

### **4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian. Офисный пакет Microsoft Office.
2. Microsoft Windows Professional 10 Russian. Операционная система Windows.
3. Adobe Acrobat Reader DC . Программное обеспечение для просмотра и печати файлов PDF.

### **4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Мир математических уравнений <http://eqworld.ipmnet.ru>
2. Поисковая машина электронных книг <http://www.poiskknig.ru>
3. Библиотечно-издательский комплекс <https://bik.sfu-kras.ru/elib/databases>
4. Научная электронная библиотека <https://elibrary.ru/defaultx.asp?>

## **5 Фонд оценочных средств**

Фонд оценочных средств является приложением к рабочей программе дисциплины (модуля), хранится на кафедре, обеспечивающей преподавание данной дисциплины (модуля).

## **6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

учебная аудитория для проведения лекционных, семинарских и практических занятий: Специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

помещение для самостоятельной работы обучающихся: специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, АРМ обучающихся, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

По дисциплине (модулю)/ практике Б1.В.12 Структурные исследования

Направление подготовки/специальность

03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Образовательная программа

03.05.02.30 Фундаментальная и прикладная физика

**1. Перечень компетенций с указанием индикаторов их достижения, соотнесенных с результатами обучения по дисциплине (модулю), практики и оценочными средствами**

Семестр <sup>1</sup>	Код и содержание индикатора компетенции	Результаты обучения <sup>2</sup>	Оценочные средства <sup>3</sup>
ПК-2: Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях			
9	ПК-2.1: Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	знает симметрию кристаллов, дифракционные эффекты взаимодействия твёрдого тела с излучением	Контрольные вопросы к экзамену; Контрольная работа; Вопросы для самоконтроля
9	ПК-2.2: Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	владеет методами исследования строения кристаллических объектов через анализ картины рассеяния исследуемым объектом волн разного типа	Контрольные вопросы к экзамену; Контрольная работа; Вопросы для самоконтроля

**2. Типовые оценочные средства или иные материалы, с описанием шкал оценивания и методическими материалами, определяющими процедуру проведения и оценивания достижения результатов обучения**

**Тема: все темы курса**

**Контрольная работа**

**Вариант 1:**

1. Имеется ось симметрии шестого порядка, к ней добавляют плоскость симметрии, параллельную оси, и центр симметрии. Определить какой возникает полный набор элементов симметрии, точечную группу симметрии.

2. Известно, что в кристалле имеются три взаимно перпендикулярные (неэквивалентные) плоскости симметрии. Определить набор элементов симметрии, сингонию, точечную группу симметрии.

<sup>1</sup> Семестры указываются по порядку, для каждого индикатора

<sup>2</sup> Указываются результаты обучения по дисциплине (модулю), практике, соотнесенные с индикатором достижения компетенции.

<sup>3</sup> Указываются оценочные средства для каждого индикатора.

3. Имеется инверсионная ось  $\bar{3}$ , к ней добавляется параллельная ей плоскость  $m$ . Определить полный набор элементов симметрии, точечную группу симметрии.

4. В кристалле имеется ось четвертого порядка и плоскости симметрии, перпендикулярные и параллельные этой оси. Определить набор элементов симметрии, сингонию, точечную группу симметрии.

5. Определить полный набор элементов симметрии и точечную группу симметрии пространственной фигуры, состоящей из восьми одинаковых шаров. Шары расположены в вершинах куба.

## Вариант 2

1. Гониометрическими измерениями в кристалле обнаружена ось симметрии 2 и перпендикулярная ей плоскость симметрии. Рентгенографические исследования не обнаружили других элементов симметрии, но подтвердили, что ось 2 не винтовая ось и что плоскость  $m$  не является плоскостью скольжения. Определить сингонию, пространственную группу и общую правильную систему точек.

2. Нарисовать граф пространственной группы  $P2_1/c$ . Выбрать начало координат. Записать в аналитическом виде полный набор элементов симметрии.

3. Нарисовать граф пространственной группы  $Pmna$ . Выбрать начало координат. Записать в аналитическом виде полный набор элементов симметрии.

4. Нарисовать граф пространственной группы  $C222_1$ . Выбрать начало координат. Записать в аналитическом виде полный набор элементов симметрии.

5. Структура куприта  $Cu_2O$  характеризуется кубической элементарной ячейкой. Атомы находятся в следующих позициях:

x    y    z

Cu1: 1/4; 1/4; 1/4

Cu2: 1/4; 3/4; 3/4

Cu3: 3/4; 1/4; 3/4

Cu4: 3/4; 3/4; 1/4

O: 1/2; 1/2; 1/2

Определить тип решетки Браве.

### Вариант 3

1. Для структуры моноклинного кристалла указана объемноцентрированная ячейка. Преобразовать эту ячейку в моноклинную базоцентрированную ячейку.
2. Ромбоэдрическая ячейка имеет параметры ячейки  $a=5.2\text{\AA}$ ,  $\alpha=62^\circ$ . Определить параметры ячейки в гексагональной установке.
3. Параметры ячейки моноклинного кристалла  $a=6.541\text{\AA}$ ;  $b=19.157\text{\AA}$ ;  $c=10.726\text{\AA}$ ;  $\beta=96.26^\circ$ , пространственная группа кристалла  $P2_1/n$ . Нарисовать граф, преобразовать ее к стандартной установке  $P2_1/c$ , определить новые параметры ячейки.
4. Параметры ячейки моноклинного органического кристалла  $a=7.272\text{\AA}$ ;  $b=8.647\text{\AA}$ ;  $c=10.427\text{\AA}$ ,  $\beta=93.20^\circ$ . Пространственная группа  $P2/c$ . Определить сколько неводородных атомов содержится в независимой части ячейки.
5. Определить элементарную ячейку обратной решетки для моноклинного кристалла  $a=7.81\text{\AA}$ ;  $b=16.02\text{\AA}$ ;  $c=3.62\text{\AA}$ ;  $\beta=102^\circ$ , пространственная группа  $P2/m$ . Определить ее объем. Оценить максимальное число рефлексов которые можно наблюдать при использовании рентгеновского излучения  $\lambda=1.54056\text{\AA}$ .

### Вариант 4

1. Для определения периода идентичности кристалла  $T$  вдоль выбранного ряда, этот ряд установили вертикально (перпендикулярно первичному пучку) и снимали рентгенограмму с кристалла, который вращался вокруг вертикали. Рентгеновская плёнка была свернута по цилиндру вокруг оси вращения диаметром 120мм. Расстояние от нулевой слоевой до первого ближайшего ряда равно 10мм. Определить период если длина волны характеристического излучения равна  $\lambda=1.54056\text{\AA}$ .
2. Оценить размеры частиц алмаза (пространственная группа  $Fd\bar{3}m$ , параметр ячейки  $a=3.566\text{\AA}$ ) если на дебаеграмме ширина линии рефлекса с индексами  $1\ 1\ 1$  равна  $0.095^\circ$  (инструментальная полуширина уже учтена и вычтена). Длина волны используемого излучения  $\lambda=1.54056\text{\AA}$ .
3. На дебаеграмме некоторого поликристаллического образца обнаружены первые 6 пиков на следующих углах  $2\theta$ :  $16.616^\circ$ ;  $19.209^\circ$ ;  $27.296^\circ$ ;  $32.125^\circ$ ;  $33.595^\circ$ ;  $38.986^\circ$ . Известно, что пространственная группа соединения  $Fm\bar{3}m$ . Определить параметр ячейки, если характеристическое излучение имеет длину волны  $\lambda=1.54056\text{\AA}$ .

4. Кристалл обладает пространственной группой  $I4/m$  и параметрами ячейки  $a=5\text{\AA}$ ,  $c=8\text{\AA}$ . Определить положения  $2\theta$  первых трех возможных пиков на рентгенограмме, если длина характеристического излучения  $\lambda=1.54056$ .

5. Для некоторого ромбического кристалла измерены интенсивности большого числа отражений и установлено, что отражения типа  $0\ 0\ 1$  существуют только при  $l=2n$ , отражения  $0\ k\ 0$  только при  $k=2n$ , отражения  $h\ 0\ 0$  только при  $h=2n$ . Других погасаний не обнаружено. Установить возможную пространственную группу кристалла.

### Вариант 5

1. Для некоторого моноклинного кристалла измерены интенсивности большого числа отражений и установлено, что отражения типа  $0\ k\ 0$  существуют только при  $k=2n$ , отражения  $h\ 0\ 1$  только при  $l=2n$ . Других погасаний не обнаружено. Установить возможную пространственную группу кристалла.

2. Для некоторого моноклинного кристалла измерены интенсивности большого числа отражений и установлено, что отражения типа  $h\ k\ 0$  существуют только при  $h+k=2n$ , отражения  $h\ 0\ 1$  только при  $l=2n$ . Других погасаний не обнаружено. Установить возможную пространственную группу кристалла.

3. Рутил  $TiO_2$  характеризуется тетрагональной ячейкой. Пространственная группа  $P4_2/mnm$ . Определить законы погасаний.

4. Пространственная группа некоторого кристалла  $Pbca$ . Определить может ли быть интенсивность рефлексов  $104$ ,  $310$ ,  $051$  и  $121$  отлична от нуля.

5. Гониометрические измерения обнаруживают в кристалле только ось шестого порядка. Интенсивность каких рефлексов необходимо измерить для определения пространственной группы кристалла.

### Вариант 6

1. Для некоторого моноклинного кристалла измерены интенсивности большого числа отражений и установлено, что отражения типа  $0\ k\ 0$  существуют только при  $k=2n$ . Других погасаний не обнаружено. Установить возможные пространственные группы. Можно ли точно установить пространственную

группу, если отношение Вильсона  $\frac{\langle |F| \rangle^2}{\langle |F|^2 \rangle}$ , для всех измеренных рефлексов равно  $0.6$  и если можно, то какая она.

2. Упростить формулу для структурной амплитуды, в случае если пространственная группа кристалла  $P2/m$ , начало координат выбрано в центре инверсии.

3. Упростить формулу для структурной амплитуды, в случае если пространственная группа кристалла  $Pmmm$ , начало координат выбрано в центре инверсии.

4. При изучении структуры кристалла (пространственная группа  $P\bar{1}$ ) были определены модули единичных амплитуд. Значение  $|U_{hkl}|$  для отражения  $1\ 0\ \bar{1}$  равно 0.73. Определить фазу отражения  $2\ 0\ \bar{2}$ .

5. При изучении структуры кристалла (пространственная группа  $P2_1/m$ ) были определены модули единичных амплитуд. Значения  $|U_{hkl}|$  для некоторых отражений приведены:

$h\ k\ l$	$ U_{hkl} $
$1\ 0\ \bar{6}$	0.51
$2\ 0\ 6$	0.40
$3\ 0\ 0$	0.31
$3\ 0\ \bar{5}$	0.17
$3\ 0\ \bar{8}$	0.50

Если установлено, что фаза отражения  $1\ 0\ \bar{6}$  равна 0, а фаза отражения  $2\ 0\ 6$  равна  $\pi$ , то для какого из этих отражений можно с большой достоверностью установить фазу и чему она будет равна.

#### **Методические рекомендации по проведению контрольной работы:**

Текущий контроль осуществляется при проведении контрольной работы.

На контрольном занятии каждый студент получает вариант задания из пяти задач и самостоятельно решает его в течение 90 минут.

#### **Критерии оценки контрольной работы:**

Оценка «отлично» выставляется студенту, если решены не менее 90% задач контрольного задания, последовательность изложения решения логически стройная и дополнена комментариями, но при этом могут быть допущены несущественные ошибки.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если решены не менее 75% задач контрольного задания, последовательность изложения решения логиче-

ски стройная, не допускаются существенных неточностей, правильно применяются теоретические положения.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если решены не менее 50% задач контрольного задания, при этом может быть нарушена логическая последовательность изложения решения, допускаются неточности и недостаточно правильные формулировки.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если решены менее 50% задач контрольного задания, допущены существенные ошибки.

### **Контрольные вопросы к экзамену:**

1. Понятие симметрии. Симметрические преобразования и элементы симметрии. Теоремы сложения операций симметрии.
2. Классы симметрии; схема вывода. Сингонии, категории.
3. Операции симметрии, содержащие сдвиг. Пространственные группы симметрии.
4. Кристаллическая решётка, решётка Браве.
5. Индексы узлов, рядов и плоскостей кристаллической решётки.
6. Природа рентгеновского излучения. Спектры излучения от разных источников.
7. Источники рентгеновского излучения. Физические процессы, приводящие к возникновению рентгеновского излучения.
8. Устройства для преобразования и регистрации рентгеновского излучения.
9. Дифракция как отражение. Уравнение Вульфа-Бреггов. Условия Лауэ.
10. Дифракционные индексы и их связь с индексами узловых плоскостей.
11. Методы получения дифракционной картины от кристалла.
12. Правила погасаний и пространственная группа симметрии кристалла.
13. Обратная решётка и обратное изображение. Интерференционное уравнение. Сфера Эвальда.
14. Тепловое движение атомов и его влияние на интенсивность рассеянных волн.
15. Получение и анализ дифракционной картины с помощью метода Лауэ.
16. Получение и анализ дифракционной картины с помощью метода качания и прецессионного метода.
17. Методы работы с порошкообразными образцами.
18. Приборы для регистрации дифракционной картины при рассеянии рентгеновского излучения.
19. Атомный, поляризационный, кинематический фактор рассеяния.
20. Аномальное рассеяние рентгеновского излучения.
21. Электронная плотность и структурная амплитуда. Связь координат атомов с интенсивностью рассеянных кристаллом рентгеновских волн.
22. Вероятностный подход к рассеянию кристаллом рентгеновских волн.
23. Структурные и фазовые инварианты, их свойства.
24. Фазовая проблема структурного анализа. Методы её преодоления.
25. Прямые методы поиска модели кристаллической структуры.

26. Функция самосвёртки и её применение в структурном анализе.
27. Метод изоморфного замещения в структурном анализе.
28. Метод аномального рассеяния в структурном анализе.
29. Уточнение структуры и анализ его результатов.
30. Методы представления результатов структурного исследования.
31. Источники и свойства нейтронного излучения.
32. Задачи, решаемые с помощью нейтронов в структурном анализе.
33. Электронография как метод структурных исследований.
34. Квазикристаллические твёрдые тела.
35. Модуляция в кристаллах её влияние на дифракционную картину.

### **Методические рекомендации по проведению экзамена:**

Экзамен является заключительным этапом изучения учебной дисциплины. Форма проведения экзамена - устный опрос по билетам. В билет включаются два теоретических вопроса из разных разделов программы.

### **Критерии оценивания студентов на экзамене:**

Оценка **«отлично»** выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал разнообразных литературных источников, владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач.

Оценка **«хорошо»** выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.

Оценка **«удовлетворительно»** выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при выполнении практических работ.

Оценка **«неудовлетворительно»** выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические работы.

### **Вопросы для самоконтроля:**

1. Каково отличие аморфных тел от кристаллических?
2. В чем состоит задача структурного исследования?
3. Какие существуют методы структурных исследований?
4. Что такое кристаллография?
5. Где находят применение структурные исследования?
6. Какую фигуру можно назвать симметричной?
7. Какие существуют оси симметрии?
8. В чем состоит различие между операцией и элементом симметрии?
9. Какие преобразования называются точечными?
10. Какая группа симметрии называется точечной?
11. Дать определение сингонии.
12. Как и по какому правилу выбираются узлы?
13. Что характеризует кристаллическую решетку?
14. Что называется элементарной ячейкой?
15. Какие и для чего существуют правила выбора ячейки?
16. Что такое группа?
17. Как определяются индексы плоскости?
18. Каков результат взаимодействия операций симметрии с трансляцией?
19. Что такое пространственная группа симметрии?
20. Как обозначаются пространственные группы?
21. Где можно найти полную информацию о пространственных группах?
22. Какое место занимают рентгеновские лучи в ряду других излучений той же природы?
23. Каковы источники рентгеновских лучей в науке?
24. Почему в рентгеновской трубке появляется рентгеновское излучение?
25. Почему синхротрон излучает электромагнитные волны?
26. Что такое ондулятор?
27. Какую форму имеет распределение энергии излучения, испускаемого электрически заряженной частицей, движущейся криволинейно и релятивистски?
28. В чем заключаются преимущества синхротронного излучения перед излучением рентгеновской трубки?
29. Какие эффекты наблюдаются при прохождении рентгена через вещество?
30. Что такое аномальное когерентное рассеяние?
31. Какие особенности строения вещества может выявить EXAFS-спектроскопия?
32. Что, в основном, рассеивает рентгеновские лучи в веществе?
33. От чего на спектре поглощения рентгена веществом появляются пульсации?
34. Что такое дифракционный эффект?
35. Как связан дифракционный эффект с интерференционным?
36. Каково следствие рассеяния рентгена множеством точечных рассеи-

44. вателей, связанных друг с другом центром инверсии?
45. Какова геометрия распределения дифракционных направлений при
46. рассеяния рентгена рядом одинаковых атомов?
47. Каким образом можно увеличить число дифракционных максимумов
48. при рассеянии рентгена тем же кристаллом?
49. Что такое индексы отражения?
50. Что такое отражающая плоскость?
51. Почему для дифракционного максимума можно использовать термин
52. «отражение»?
53. Что называется закономерным погасанием отражения?
54. Как повлияет выбор центрированной ячейки на описание дифракционной
- картины?
55. Что называют «дифракционной группой симметрии» и как связаны
56. пространственная и дифракционная группы симметрии?
57. Каково отличие между обратным изображением и обратной решет-
58. кой кристалла?
59. Что называют  $I$ -телом?
60. Что определяется интерференционным уравнением?
61. Для чего вводится в рассмотрение сфера Эвальда?
62. Как выглядит сфера Эвальда при использовании белого излучения?
63. Сколько ориентаций кристалла можно выбрать для получения одного
64. и того же отражения?
65. С какой целью делают снимки Лауэ?
66. Что в структурных исследованиях называют зоной?
67. Какими симметриями могут быть описаны лауэграммы?
68. Какова должна быть ориентация кристалла при снятии рентгено-
69. граммы вращения?
70. Какие фотографические методы регистрации дифракционной карти-
71. ны используются для установления правил погасания?
72. В чем принципиальное отличие камер КФОР, Вайсенберга и прецес-
73. сионной от РКОП?
74. Что такое порошковая рентгенограмма?
75. Как готовится образец для съемки по методу Дебая – Шеррера?
76. Какой образец является текстурованным?
77. Какая информация извлекается из порошковой рентгенограммы?
78. Как готовится образец для съемки по методу Брега – Брентано?
79. Что необходимо для фазового анализа?
80. Что такое поляризационный фактор?
81. Что такое функция атомного рассеяния?
82. От чего зависит функция атомного рассеяния?
83. Что происходит с рентгеном, если его частота близка к краю полосы
84. поглощения?
85. Почему  $\cdot f \cdot$  называется дисперсионной компонентой?

86. Что такое структурный фактор?
87. Какой эффект оказывает на рассеяние рентгена замена группы атомов кристаллом?
88. Каким образом?
89. Каковы фактически экспериментальные действия для учета эффектов, связанных с введением фактора Лоренца?
90. Что такое структурная амплитуда?
91. Как связаны структурная амплитуда и электронная плотность?
92. Какая информация добывается при первичной обработке эксперимента по рассеянию рентгена кристаллом?
93. Как влияет амплитуда колебаний атомов на интенсивность отражений?
94. Как влияет тип межатомной связи на амплитуду колебаний атомов?
95. Как определить тепловой параметр из экспериментальных данных?
96. Что такое анизотропные тепловые параметры атома?
97. Что такое ангармонизм колебаний атомов?
100. Почему возможен вероятностный подход к рассмотрению картины рассеяния рентгена кристаллом?
101. Как реагирует структурная амплитуда на сдвиг начала координат?
102. Что называется структурным инвариантом?
103. Что такое фазовый инвариант?
104. Какие методы определения структуры кристалла называются прямыми?
105. Какая основная формула работает в прямых методах?
106. Какой математический смысл имеет функция Паттерсона?
107. О чем свидетельствует расстояние от начала координат до максимума в распределении функции Паттерсона?
108. Что изоморфно можно заменить в низкомолекулярном соединении?
109. На чем базируется метод аномального рассеяния?
110. Какое устройство наиболее подходит для сбора данных к методу аномального рассеяния?
111. Какой из методов определения структуры наиболее продуктивен в структурных исследованиях?
112. Каким образом развивается фрагмент структуры?
113. Что такое синтез разностной электронной плотности?
114. Что такое фактор достоверности?
115. Что такое деформационная плотность?
116. В чем суть метода Ритвельда?
117. Из каких частей состоит дифрактометр?
118. Какие виды атомных реакторов существуют?
119. Что называется спектральным составом пучка нейтронов?
120. На чем рассеиваются нейтроны?
121. Какая часть обратного изображения фотографируется с помощью рассеяния электронов?
122. В чем суть несоразмерной модуляции?
123. В чем состоит главное отличие квазикристаллов от кристаллов?

### **Методические рекомендации по самоконтролю**

Для текущего самоконтроля качества усвоения теоретических знаний, полученных на лекциях и практических занятиях, студент отвечает на вопросы самоконтроля.

### **Критерии оценивания самоконтроля**

Успешно пройденным считается самоконтроль, если студент правильно отвечает на 60% вопросов для самоконтроля. Если выполнено менее 60%, то имеет смысл ещё раз просмотреть и проработать теоретический материал.

Разработчик



М.С.Молокеев