

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Введение в рентгеноструктурный анализ
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики и химии наноструктур
курс:	4
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 15 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: Н.Р. Серебряная, д-р хим. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики и химии наноструктур 29.05.2020

Аннотация

Курс "Введение в рентгеноструктурный анализ" имеет своей целью освоение студентами фундаментальных знаний в области рентгеноструктурного анализа и выработка практических навыков применения рентгеноструктурного метода к исследованию строения вещества.

Задачи курса:

- изложение основных положений теории симметрии кристаллов и дифракции рентгеновских лучей кристаллическим веществом;
- освоение студентами базовых знаний в области рентгеноструктурного анализа;
- приобретение теоретических знаний в области исследования свойств реальных кристаллов;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области рентгеноструктурного анализа.

По результатам освоения курса студент должен:

Знать:

фундаментальные понятия, законы, теории в области кристаллографии и дифракции;
численные порядки величин, характерные для различных разделов физики;
современные проблемы физики, химии, математики;
основные методы рентгеноструктурного анализа кристаллов;
основы кристаллохимии и кристаллофизики.

Уметь:

определять размеры ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла;
применять правило погасаний;
определять тип решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка;
использовать программы для определения кристаллических структур;
определять интенсивность дифракционных отражений;
анализировать структуры аморфных и дисперсных веществ.

Владеть:

навыками освоения большого объема информации;
культурой постановки и моделирования физических задач;
навыками решения типовых задач и задач повышенной трудности теоретического и экспериментального плана с использованием методов вычислительной математики и информатики;
практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач;
навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами микроскопических и наносистем, обладающих как дискретным, так и непрерывным спектрами;
основными математическими, теоретическими и экспериментальными физическими методами исследований на профессиональном уровне.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Анализ структуры аморфных и дисперсных веществ.
2. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Методы получения дифракционной картины.
3. Интенсивность дифракционных отражений.
4. Определение размеров элементарной ячейки, типа решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка.
5. Определение размеров ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла. Правила погасаний. Индексирование рентгенограмм монокристаллов.
6. Основные понятия и термины из теории симметрии и структуры кристаллов.
7. Фазовые превращения.
8. Физика рентгеновских лучей. Получение и регистрация рентгеновских лучей.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- освоение студентами фундаментальных знаний в области рентгеноструктурного анализа и выработка практических навыков применения рентгеноструктурного метода к исследованию строения вещества.

Задачи дисциплины

- изложение основных положений теории симметрии кристаллов и дифракции рентгеновских лучей кристаллическим веществом;
- освоение студентами базовых знаний в области рентгеноструктурного анализа;
- приобретение теоретических знаний в области исследования свойств реальных кристаллов;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области рентгеноструктурного анализа.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
	ПК-3.1 Знает принципы работы и диапазоны рабочих параметров используемого научного оборудования
	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

фундаментальные понятия, законы, теории в области кристаллографии и дифракции;
численные порядки величин, характерные для различных разделов физики;
современные проблемы физики, химии, математики;
основные методы рентгеноструктурного анализа кристаллов;
основы кристаллохимии и кристаллофизики.

уметь:

определять размеры ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла;
применять правило погасаний;
определять тип решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка;
использовать программы для определения кристаллических структур;
определять интенсивность дифракционных отражений;
анализировать структуры аморфных и дисперсных веществ.

владеть:

навыками освоения большого объема информации;
 культурой постановки и моделирования физических задач;
 навыками решения типовых задач и задач повышенной трудности теоретического и экспериментального плана с использованием методов вычислительной математики и информатики;
 практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач;
 навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами микроскопических и наносистем, обладающих как дискретным, так и непрерывным спектрами;
 основными математическими, теоретическими и экспериментальными физическими методами исследований на профессиональном уровне.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Анализ структуры аморфных и дисперсных веществ.	2		2	7
2	Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Методы получения дифракционной картины.	4		2	8
3	Интенсивность дифракционных отражений.	4		2	7
4	Определение размеров элементарной ячейки, типа решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка.	2		2	8
5	Определение размеров ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла. Правила погасаний. Индексирование рентгенограмм монокристаллов.	4		2	7
6	Основные понятия и термины из теории симметрии и структуры кристаллов.	4		2	8
7	Фазовые превращения.	4		2	7
8	Физика рентгеновских лучей. Получение и регистрация рентгеновских лучей.	6		1	8
Итого часов		30		15	60
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Анализ структуры аморфных и дисперсных веществ.

Ближний и дальний порядок. Функция радиального распределения. Методы изучения структуры ультрадисперсных систем.

2. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Методы получения дифракционной картины.

Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Кристаллографические проекции. Сетка Вульфа. Метрика обратного пространства. Обратная решетка и ее связь с характеристикой атомно-кристаллической решетки.

Геометрическая теория дифракции на трехмерной решетке рассеивающих центров. Уравнение Вульфа-Брэгга.

Основные дифракционные схемы в представлении обратной решетки: метод Лауэ, метод вращения (качания), прецессионные методы. Метод порошка.

3. Интенсивность дифракционных отражений.

Второй этап структурного анализа: анализ интенсивности и определение координат атомов. Фактор Лоренца, фактор поляризации, поправка на поглощение. Экстинкция. Структурная амплитуда. Форма и размеры узлов обратной решетки. Температурный фактор, фактор повторяемости. Понятие об удельной отражательной способности системы плоскостей.

Синтез Фурье как метод анализа атомной структуры кристалла. Разложение электронной плотности в трехмерный ряд Фурье, структурные амплитуды как коэффициенты ряда. Решение фазовой проблемы. Метод тяжелого атома. Синтез Паттерсона. Уточнение структуры методом наименьших квадратов. Метод проб и ошибок. Фактор достоверности.

4. Определение размеров элементарной ячейки, типа решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка.

Индицирование дифрактограмм, выявление сингонии. Индицирование порошкограмм кубической и средних сингоний. Погрешности в определении параметра решетки кубического кристалла. Индицирование порошкограмм низших сингоний. Определение пространственной группы.

5. Определение размеров ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла. Правила погасаний. Индицирование рентгенограмм монокристаллов.

Определение размеров ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла. Первый этап анализа структуры: определение периодов идентичности, размеров элементарной ячейки и числа формульных единиц в ячейке. Камеры для определения периодов идентичности. Определение точечной группы симметрии по симметрии рентгенограмм. Дифракционная симметрия. Закон центросимметричности. Возможность определения точечной группы симметрии, определение класса дифракционной симметрии по закономерностям расположения пятен на рентгенограммах (4 часа)

Правила погасаний. Систематические погасания рентгеновских рефлексов, связанные с типом решетки Бравэ, наличием винтовых осей и плоскостей скользящего отражения. Определение пространственной группы симметрии. Псевдосимметрия и псевдопогасания. (2 часа).

Индицирование рентгенограмм. Определение понятия обратного изображения. Координатная система обратного изображения. Формулы структурной кристаллографии.

Интерференционное уравнение и сфера отражения. Индицирование рентгенограмм, полученных фотометодом, и индицирование дифрактограмм. (2 часа).

6. Основные понятия и термины из теории симметрии и структуры кристаллов.

Структура кристалла и структурный тип. Вид симметрии кристалла. Кристаллическая решетка и структура кристалла. Кристаллические многогранники. Решетки Бравэ. Миллеровские индексы.

Элементы симметрии кристаллических структур. Трансляция. Плоскости скользящего отражения и винтовые оси. Сложение плоскостей симметрии. Выбор начала координат. Пространственная и точечная группы симметрии. Прimitives и непрimitives пространственные группы. Правильные системы точек. Кратность точек.

Степени свободы точек. Число частных и общих правильных систем точек в структуре. Запрещенные значения координат. 230 пространственных групп. Классификация пространственных групп. Международные кристаллографические таблицы. Понятие о рациональном расположении и числе атомов в ячейке в соответствии с кратностью позиций. Плотнейшие шаровые упаковки и дефекты упаковки. Тетра- и октопоры в структуре.

7. Фазовые превращения.

Структуры фаз высокого давления. Алмазные рентгеновские камеры высокого давления. Кристаллохимический анализ структур фаз высокого давления. Полиморфизм. Модулированные несоизмеримые структуры. Фуллерены и их полимеризация при высоких давлениях и высоких температурах.

8. Физика рентгеновских лучей. Получение и регистрация рентгеновских лучей.

Введение. Открытие рентгеновских лучей, развитие представлений об их свойствах. Предмет и методы рентгеноструктурного анализа. Применение рентгеновских лучей.

Физика рентгеновских лучей. Рентгеновское излучение и его спектр. Линейчатый спектр. Характеристический спектр. Сплошной спектр. Выбор анода.

Поглощение рентгеновских лучей при прохождении через вещество. Когерентное и некогерентное рассеяние. Линейный и массовый коэффициенты поглощения. Выбор излучения и его монохроматизация. $K\alpha$ и $K\beta$ излучения. Фильтры. Синхротронное излучение. Рассеяние свободным электроном. Функция атомного рассеяния. Амплитуда атомного рассеяния. (2 часа)

Получение рентгеновских лучей. Рентгеновские трубки (электронные и ионные). Размер фокусного пятна, микрофокусные трубки. Трубки с вращающимся анодом. Коллиматоры. Рентгеновские аппараты. (2 часа).

Регистрация рентгеновского излучения. Фотографический метод. Точечные и координатные счетчики. Твердотельные (полупроводниковые) детекторы. (2 часа).

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, персональные компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. М.: МГУ, 1964, т. I.
2. И. П. Суздальев. Нанотехнология. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Изд-во КомКнига, 2006.
3. Л. Н. Сидоров, М. А. Юровская, А. Я. Борщевский, И. В. Трушков, И. Н. Иоффе. Фуллерены. М.: Экзамен, 2004.
4. Г. В. Фетисов. "Синхротронное излучение". М.: Физматлит, 2007.

Дополнительная литература

1. Л. А. Асланов. Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. М.: МГУ, 1983.
2. А. Ф. Скрышевский. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа, 1980.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Моделирование структур по программе «Crystallographica». Профильный анализ (Метод Ритвельда), программа «FullProf» для определения структур из порошковых данных.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики и химии наноструктур
курс:	<u>4</u>
квалификация:	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	Н.Р. Серебряная, д-р хим. наук, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
	ПК-3.1 Знает принципы работы и диапазоны рабочих параметров используемого научного оборудования
	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Введение в рентгеноструктурный анализ» обучающийся должен:

знать:

фундаментальные понятия, законы, теории в области кристаллографии и дифракции;
численные порядки величин, характерные для различных разделов физики;
современные проблемы физики, химии, математики;
основные методы рентгеноструктурного анализа кристаллов;
основы кристаллохимии и кристаллофизики.

уметь:

определять размеры ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла;
применять правило погасаний;
определять тип решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка;
использовать программы для определения кристаллических структур;
определять интенсивность дифракционных отражений;
анализировать структуры аморфных и дисперсных веществ.

владеть:

навыками освоения большого объема информации;
культурой постановки и моделирования физических задач;
навыками решения типовых задач и задач повышенной трудности теоретического и экспериментального плана с использованием методов вычислительной математики и информатики;
практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач;
навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами микроскопических и наносистем, обладающих как дискретным, так и непрерывным спектрами;
основными математическими, теоретическими и экспериментальными физическими методами исследований на профессиональном уровне.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1) Комплект задач на определение видов симметрии и пространственных групп в структурах.
1.Перечислить симметрические операции, входящие в группу симметрии следующих плоских молекул:

этилен	дифенил	о-дихлорбензол
бромбензол	H ₂ O	HClO

2. Изобразить на проекции расположение элементов симметрии в следующих точечных группах: 2/m; mmm; 32; 422; 4/₂; 23; m3; m3m. Определить категорию этих точечных групп.

3.Какова симметрия бабочки, трехлопастного пропеллера, кирпича, гантели, рюмки?

4. Определить группу симметрии фигур, образующихся при сечении следующих многогранников:

многогранник Сечение проведено

тригональная пирамида через высоту и боковое ребро

тригональная пирамида через высоту параллельно стороне основания

тетрагональная дипирамида через высоту и боковое ребро

октаэдр через плоскость симметрии

5.Определить симметрию позиции атома в структуре α -Fe. Какой станет эта симметрия при деформации структуры 1) вдоль оси 4, 2) вдоль оси 2, 3) вдоль оси 3.

6. Определить категорию точечных групп: D₂, C_{2v}, C_{3v}, S₄, C_{4h}, D_{6h}, C_{6h}, Th, O, I.

7. Определить точечную группу плоских молекул:

8. Определить точечную группу:

9. Записать символ точечной группы минимального порядка, включающей элементы симметрии: 1) две взаимно перпендикулярные оси 2; 2) оси 2, пересекающиеся под углом 60°; 3) две взаимно перпендикулярные плоскости σ ; 4) плоскости, пересекающиеся под углом 45°.

10. Доказать, что не может существовать а) элементарная ячейка, у которой центрированы две пары граней, б) базоцентрированная кубическая ячейка.

11. В гексагональной примитивной решетке выбрать ортогональный параллелепипед повторяемости минимального объема. Выразить его параметры через параметры элементарной ячейки.

12. В кристаллической структуре AB₂C₄ атомы C образуют плотнейшую упаковку. Координационное число атомов A равно 4, а атомов B – 6. Каков тип занятых пустот? Какая часть пустот заполнена?

13. Записать символ точечной группы минимального порядка, включающей элементы симметрии: 1) две взаимно перпендикулярные оси 2, 2) оси 2, пересекающиеся под углом 60°, 3) оси 2, пересекающиеся под углом 120°, 4) две взаимно перпендикулярные плоскости σ , 5) плоскости σ , пересекающиеся под углом 30°, 6) три плоскости σ .

14. Найти элементы симметрии, которые возникают при действии перпендикулярной трансляции на следующие оси: 3; 4₂; 6; 6₂; 6₄.

15.Вещество состава АВ имеет кристаллическую структуру с симметрией Pnnm. Параметры элементарной ячейки: a=10.0 Å, b=2.0 Å, c=5.0 Å. Координаты атомов: А x=0, y=1/2, z=1/5; В x=y=z=0. Изобразить расположение атомов в ячейке и рассчитать кратчайшее расстояние между атомами.

16.Элементарная ячейка кристалла имеет параметры: a=8.55 Å, b=8.80 Å, c=16.0 Å, β =97.50. Вычислить параметры обратной решетки для λ =1,54 Å.

17. Ячейка имеет форму куба. Атом А располагается в вершинах ячейки, атом В – в произвольной точке. Какова пространственная группа структуры, если атомы А и В 1)одинаковые, 2) разные?

18. Кратчайшее межатомное расстояние в одной из модификаций стронция равно 4.18 Å (структурный тип α -железа, объемноцентрированная структура). Определить плотность кристаллов.

19. Найти отношение плотности алмаза и графита, если параметр кубической ячейки алмаза 3.56 Å, а параметры гексагональной решетки графита $a=2.46$ Å, $c=6.7$ Å. Структурные типы алмаза и графита считать известными.

20. Кристаллы хлорида ртути имеют плотность 5.44 г/см³. Установить, является этот хлорид каломелью Hg_2Cl_2 или сулемой HgCl_2 , если параметры тетрагональной ячейки каломели $a=4.47$ Å, $c=10.89$ Å, $Z=2$, параметры орторомбической ячейки сулемы $a=5.96$ Å, $b=12.74$ Å, $c=4.32$ Å, $Z=4$.

21. Кристаллы CsNiCl_3 имеют следующую структуру: атомы Cl и Cs образуют совместную двойную шаровую упаковку, а атомы Ni находятся в октаэдрических пустотах. Определить, какая часть октаэдрических пустот заполнена.

2) Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена:

1. Симметрия, симметрические операции, точечные группы симметрии, сложение элементов симметрии, теоремы о сложении, классы симметрии.

2. Какую симметрическую операцию надо добавить к данной совокупности симметрических операций для того, чтобы получилась точечная группа симметрии?

a) $m(x)$, $m(Y)$, $2(Z)$; b) 1, 1, $m(Z)$; c) 1, 1, $2(Z)$.

3. Проиндцировать отражения и определить размеры соответствующих элементарных ячеек (даны $\sin 2\theta$ на $\text{Co K}\alpha$ –излучении): 0.0393; 0.0597; 0.0786; 0.1184; 0.1572.

4. Сингонии, элементарная ячейка и ее характеристики для каждой сингонии.

5. Определить тип решетки, примитивный параллелепипед которой имеет приведенные ниже характеристики (атомы располагаются только в вершинах этого параллелепипеда), изобразить проекцию элементарной ячейки.

вид основания
параллелепипеда

Относительное расположение
верхнего и нижнего
оснований

ромб $c=600$

боковые ребра перпендикулярны плоскости
основания

прямоугольник

произвольное расположение
(рассмотреть 2 случая: с перпендикулярными
ребрами и не перпендикулярными ребрами).

6. . Натрий кристаллизуется в двух модификациях (Структурные типы Cu α -Fe). Параметр одной из них равен 4, 28 Å. Определить, какая это модификация и рассчитать ее плотность. (α -Fe. Атомы – в вершинах и в центре кубической ячейки.

Медь (Cu). Атомы – в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней.).

7. Первый этап рентгеноструктурного анализа. Определение размеров элементарной ячейки, плотности, индцирование.

8.а) В кубических кристаллах CsCl расстояние Cs – Cl равно 3.46 Å. Определить плотность кристаллов CsCl . Структура хлорида цезия: атомы Cl – в вершинах кубической ячейки, атомы цезия – в ее центре.

б) Определить плотность кубических кристаллов SrCl_2 (структурный тип флюорита, если расстояние Sr – Cl равно 3.02 Å. Структурный тип флюорита CaF_2 : атомы Ca – в вершинах кубической ячейки и в центрах всех граней, атомы фтора занимают центры всех восьми октантов.

9. Проиндцировать и найти размеры ячейки: 0.106, 0.318, 0.424, 0.742, 0.954. (даны $\sin 2\theta$ на $\text{Co K}\alpha$ –излучении)

10. Типы плотнейших упаковок, привести примеры структур с плотнейшими упаковками атомов. Изображение структур координатными многогранниками.

10а. В кристаллической структуре состава AXBYC_{12} атомы C образуют плотнейшую шаровую упаковку, атомы A занимают $3/8$ тетраэдрических пустот, а атомы B – $2/3$ октаэдрических пустот. Найти X и Y.

10б. Кварц – гексагональная структура, $a=4,913$ Å, $c=5,405$ Å. На рентгенограмме зарегистрированы линии под следующими углами: 10,44; 13,34; 18,32; 19,78; 20,18; 21,28; 22,90; 25,15; 27,54; 27,76; 30,06; 32,12.

Найти индексы этих линий и рассчитать объем элементарной ячейки

11. Погасания и пространственные группы.

12. Элементарная ячейка дифенила ($C_6H_5C_6H_5$) имеет параметры:

$a=8.24 \text{ \AA}$, $b=5.73 \text{ \AA}$, $c=9.51 \text{ \AA}$, $\beta=94.50$.

Найти число молекул в элементарной ячейке, если плотность равна 1.16 г/см^3 . Известно, что имеются систематические погасания $h0l$ с нечетными h и $0k0$ с нечетными k . Определить пространственную группу кристалла. Какие заключения можно сделать о симметрии молекулы и о ее расположении в элементарной ячейке?

13. Общая схема второго этапа рентгеноструктурного анализа

14. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле и способы получения дифракционной картины.

15. Понятие обратной решетки.

Примеры экзаменационных билетов.

Пример 1.

1. Проиндентифицировать отражения и определить размеры соответствующих элементарных ячеек (даны $\sin^2\theta$ на $Co K\alpha$ –излучении): 0.0393; 0.0597; 0.0786; 0.1184; 0.1572.

2. Общая схема второго этапа рентгеноструктурного анализа

Пример 2.

1. Какую симметрическую операцию надо добавить к данной совокупности симметрических операций для того, чтобы получилась точечная группа симметрии?

a) $m(x)$, $m(Y)$, $2(Z)$; b) 1 , 1 , $m(Z)$; c) 1 , 1 , $2(Z)$.

2. Понятие обратной решетки.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.