

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Базовая кафедра нанотехнологий в электронике  
в ЯФ ФГБУН ФТИАН им. К. А. Валиева РАН

УТВЕРЖДАЮ  
Декан физического факультета



И.С. Огнев

« 23 » мая 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ»**

Направление подготовки  
11.04.04 Электроника и нанoeлектроника

Направленность (профиль)  
«Интегральная электроника и нанoeлектроника»

Форма обучения  
Очная

Программа одобрена на заседании  
кафедры от « 30 » марта 2023 года,  
протокол № 8

Программа одобрена НМК физического  
факультета  
протокол № 5 от «25» апреля 2023 года

Ярославль

## 1. Цели освоения дисциплины

Главной целью освоения дисциплины "Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ" является ознакомление студентов с основными принципами и возможностями метода рентгеновской дифракции, которое подкрепляется лабораторными работами на современном оборудовании по задачам, основанным на реально выполняемых на рентгеновском дифрактометре исследованиях.

Давая возможность студентам применить свои знания, отработать умения и навыки на конкретном оборудовании и программном обеспечении с реальными объектами, дисциплина знакомит их с научным аналитическим оборудованием и исследовательскими задачами вообще и с подобными дифрактометрами в частности.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП магистратуры

Дисциплина "Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ" является дисциплиной по выбору и относится к вариативной части.

Освоение данной дисциплины во многом основывается на знаниях, полученных при изучении дисциплин: "Основы кристаллографии и кристаллохимии", "Численные методы", "Физика атомов и атомных явлений", "Метрология, стандартизация и технические измерения", "Физика конденсированного состояния". В процессе освоения дисциплины слушатели знакомятся с методом рентгеновской дифракции, устройством и принципами работы рентгеновских дифрактометров, функциями, описывающими дифракционную картину и дифракционные пики, их свойствами. В курсе рассматриваются принципы работы рентгеновской трубки, полупроводникового детектора Пельтье, геометрия самофокусировки.

## 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОП магистратуры

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умения, навыков и (или) опыта деятельности

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Профессиональные компетенции</b>		
ПК-3. Готов осваивать принципы планирования и методы автоматизации эксперимента на основе информации - измерительных комплексов как средства повышения точности и снижения затрат на его проведение, овладевать навыками измерений в реальном времени.	ИД_ПК-3.1. Демонстрирует знание принципов планирования и автоматизации проведения эксперимента.  ИД_ПК-3.2. Умеет разрабатывать требования к средствам проведения эксперимента, контроля и диагностики.  ИД_ПК-3.3. Обладает навыками тестирования и диагностики изделий микро- и нанoeлектроники. методологии исследования изделий микро- и нанoeлектроники.	<b>Знать:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• Принципы работы основных узлов дифрактометра</li><li>• Главные виды дифракционной съемки</li><li>• Основные функции специального программного обеспечения</li></ul> Зависимости получаемых экспериментальных данных от выбранных параметров съемки  <b>Уметь:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• Выбрать метод пробоподготовки, режим съемки (мощность трубки, длительность экспозиции, величину шага, исследуемый диапазон углов)</li><li>• Проводить эффективный поиск в базе рентгенодифракционных данных ICDD</li></ul> Вычислять профиль дифракционных пиков и размер кристаллитов  <b>Владеть навыками:</b>

		<ul style="list-style-type: none"> <li>Постепенного выведения оборудования в рабочий режим и его выключения</li> <li>Программирования исследовательского задания для ARL X'TRA в WinXRD</li> <li>Обработки дифракционных файлов и идентификации исследованной фазы средствами WinXRD и ICDD DDView</li> </ul>
ПК-4. Способен к организации и проведению экспериментальных исследований с применением современных средств и методов.	<p>ИД_ПК-4.1. Знает способы организации и проведения экспериментальных исследований.</p> <p>ИД_ПК-4.2. Способен самостоятельно проводить экспериментальные исследования.</p> <p>ИД_ПК-4.3. Демонстрирует навыки проведения исследований с применением современных средств и методов.</p>	<p><b>Знать</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Требования к исследуемому образцу для конкретного прибора и метода</li> <li>Основные принципы рентгеновской дифракции</li> </ul> <p>Задачи, которые позволяет решать данный метод, материалы, для которых он может эффективно использоваться</p> <p><b>Уметь</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Работать с экспериментальными данными в сторонних программах</li> </ul> <p>Проводить сравнительный анализ серии различных образцов</p> <p><b>Владеть навыками</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Подготовки и установки образцов для исследования в ARL X'TRA</li> </ul> <p>Самостоятельной работы с различными источниками информации по тематике курса</p>

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости
			Контактная работа						Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Рентгеновское излучение	3	2		2			5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
2	Лабораторное оборудование и работа на нем	3	2		4			5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
3	Рентгенофазовый анализ	3	2		2	1		5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
4	Интенсивность рефлексов	3	2		2	1		5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе

5	Размер кристаллитов и микронапряжения	3	2		2	1		5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
6	Рентгеноструктурный анализ	3	4		2	1		5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
7	Другие прикладные вопросы	3	2		2	1		5	Устный опрос Отчет по лабораторной работе
	<b>Всего</b>		<b>16</b>	<b>0</b>	<b>16</b>	<b>5</b>	<b>0</b>	<b>35</b>	

### Содержание разделов дисциплины

#### Тема №1. Рентгеновское излучение

1.1 Основы физики и свойства рентгеновского излучения. 1.2 Спектральное распределение интенсивности характеристического излучения. 1.3 Спектральное распределение интенсивности тормозного (белого) излучения. 1.4 Поглощение рентгеновского излучения. Край поглощения и флуоресцентное излучение. 1.5 Когерентное и некогерентное рассеяние рентгеновского излучения. 1.6 Преломление рентгеновских лучей. 1.7 Длины волн рентгеновских лучей. 1.8 Единицы измерения. 1.9 Точность измерения.

#### Тема №2. Лабораторное оборудование и работа на нем

2.1 Рентгеновские дифрактометры. 2.2 Рентгеновская трубка и получение рентгеновских лучей. 2.3 Выбор излучения. 2.4 Приемы ослабления фона, фильтры. 2.5 Регистрация рентгеновского излучения. 2.6 Детекторы рентгеновского излучения. 2.7 Счетчики Гейгера-Мюллера. 2.8 Пропорциональный счетчик. 2.9 Сцинтилляционный счетчик. 2.10 Полупроводниковый детектор. 2.11 Измерение интенсивности счетчиками фотонов. 2.12 Геометрия съемки и устройство гониометра. 2.13 Юстировка и калибровка гониометра. 2.14 Требования к технике безопасности при работе с рентгеновским дифрактометром. 2.15 Порошковый рентгеновский дифрактометр ARL X'TRA Thermo Scientific. 2.16 Подготовка образцов. 2.17 Погрешности в определении углов дифракции. 2.18 Источники ошибок в определении межплоскостных расстояний. Зависимость точности в определении  $d$  от угла отражения. 2.19 Графическая экстраполяция. 2.20 Метод наименьших квадратов. 2.21 Термостатирование образца. 2.22 Поправка на преломление.

#### Тема №3. Рентгенофазовый анализ

3.1 Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. 3.2 Основные уравнения дифракции рентгеновских лучей. 3.3 Условие возникновения максимума интенсивности. 3.4 Идентификация кристаллических материалов. 3.5 Общие методы идентификации, фазового анализа. 3.6 Описание и обработка порошковых рентгенограмм. 3.7 Карточка порошковых дифракционных данных (PDF ICDD). 3.8 Некоторые практические трудности, чувствительность метода. 3.9 Система автоматической идентификации веществ по рентгенограммам (WinXRD+DDView). 3.10 Метод подбора изоструктурных соединений. 3.11 Фазовый анализ смеси двух веществ. 3.12 Определение пропорций составных частей смеси, количественный фазовый анализ. 3.13 Метод Ритвельда.

#### Тема №4. Интенсивность рефлексов

4.1 Вычисление интенсивностей рентгеновских рефлексов. 4.2 Формула для относительной интенсивности. 4.3 Угловой фактор. 4.4 Фактор поглощения. 4.5 Экстинкция. 4.6 Фактор повторяемости. 4.7 Структурный фактор. 4.8 Определение структурного фактора и структурной амплитуды. 4.9 Атомный фактор. 4.10 Атомный фактор и распределение электронов. 4.11 Расчет атомного фактора для свободных атомов. 4.12 Температурный фактор. 4.13 Геометрический структурный фактор. 4.14 Отсутствие рефлексов (погасание), обусловленное типом решетки.

#### Тема №5. Размер кристаллитов и микронапряжения

5.1 Влияние размеров кристаллитов, деформации, микронапряжений и

несовершенств решетки на дифракционную картину и ширину дифракционной линии.

5.2 Определение ширины порошковых линий. 5.3 Эффективный размер кристаллитов. 5.4 Распределение частиц по размерам. 5.5 Смещение линий на рентгенограммах поликристаллического образца. 5.6 Измерение внутренних напряжений. 5.7 Микронапряжения и определение "истинной" формы дифракционной кривой. 5.8 Оценка "истинной" полуширины линии по значениям полуширины образца и эталона. 5.9 Искажения решетки, меняющиеся по закону косинуса. 5.10 Искажения решетки, приводящие к изменению интенсивности линий. 5.11 Проблемы точности, систематические ошибки.

Тема №6. Рентгеноструктурный анализ.

6.1 Определение размеров элементарной ячейки кристалла и трансляционной группы. 6.2 Учет конечного размера атомов при размещении их в ячейке. 6.3 Геометрический анализ ионных кристаллов на основе теории плотной упаковки. 6.4 Геометрический анализ молекулярных кристаллов. 6.5 Вычисление коэффициента упаковки. 6.6 Тожественные и подобные ячейки. 6.7 Определение пространственной группы, симметрия расположения атомов и молекул в ячейке и химическая формула. 6.7 Расчет рентгенограмм в случае известной ячейки. 6.8 Расчет рентгенограммы в случае неизвестной ячейки. 6.9 Зависимость межплоскостных расстояний от симметрии и параметров решетки. 6.10 Прецизионное определение параметров элементарной ячейки известных структур. 6.11 Определение структуры кристаллов методом Фурье.

Тема №7. Другие прикладные вопросы

7.1 Определение молекулярного веса и плотности. 7.2 Определение коэффициентов теплового расширения. 7.3 Определение фазовых границ на диаграммах состояния. 7.4 Определение плотности и молекулярного веса. 7.5 Изучение сверхструктурных образований в сплавах. 7.6 Методы рентгендифрактометрического анализа структуры некристаллических объектов. 7.7 Атомная структура металлов и сплавов. 7.8 Механическая обработка и отжиг. 7.9 Превращения в твердом состоянии. 7.10 Влияние текстуры на интенсивность. 7.11 Исследования текстуры. 7.12 Типы текстур.

## **5. Образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** - дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (или лекция общего курса) - последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

**Лабораторные работы** - организация учебной работы с реальными материальными и информационными объектами, экспериментальная работа с аналоговыми моделями реальных объектов и физических явлений.

## **6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень лицензионного**

## **программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- Мультимедийные презентации
- Ресурсы сайтов [atelearning.com](http://atelearning.com), [icdd.com](http://icdd.com), [nist.gov](http://nist.gov), [rruff.info](http://rruff.info), [crystallography.net](http://crystallography.net), [mindat.org](http://mindat.org), [webmineral.com](http://webmineral.com) и т.д.;
- Для формирования текстовых и графических материалов промежуточной и текущей аттестации - программы Libre Office, графический редактор GIMP;
- Для проведения обработки данных - математический пакет SciLab.
- Для поиска учебной литературы библиотеки ЯрГУ - Автоматизированная библиотечная информационная система "БУКИ-NEXT" (АБИС "Буки-Next").

## **7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Илюшин А. С. Дифракционный структурный анализ в 2 ч. Часть 1: Учебное пособие. / Илюшин А.С., Орешко А.П. - 2-е изд. - М.: Издательство Юрайт, 2017. - 327.
2. Илюшин А. С. Дифракционный структурный анализ в 2 ч. Часть 2: Учебное пособие. / Илюшин А.С., Орешко А.П. - 2-е изд. - М.: Издательство Юрайт, 2017. - 299.
3. Панова Т.В. Рентгеноструктурный анализ. Краткий курс лекций. / Т.В. Панова - Омск: Омский государственный университет, 2012. - 124 с.

### **б) дополнительная литература**

1. Павлинский Г. В. Основы физики рентгеновского излучения. / Г. В. Павлинский - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. - 240 с.
2. Миркин Л. И. Рентгеноструктурный анализ. Индексирование рентгенограмм: справочное руководство. / Л. И. Миркин - М.: Наука, 1981. - 496 с.
3. Анищик В.М. Дифракционный анализ. / В.М. Анищик; Понарядов В. В; Углов В. В - Минск: Вышэйшая школа, 2011. - 216 с.
4. Задорожный Н.А. Изучение дифракции электронов на кристаллической решетке металлов: Методические указания к лабораторной работе К-60 по курсу общей физики. / Н.А. Задорожный; Тимченко С. Л; Юрасов Н. И - Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. - 14 с.
5. Гуфан А.Ю. Применение методов теории вероятностей при интерпретации дифрактограмм твердых растворов. / А.Ю. Гуфан; Гуфан К. Ю - Ростов-н/Д: Издательство Южного федерального университета, 2010. - 64 с.
6. Хвольсон О.Д. Строение атома (бор-зоммерфельд) и рентгеновы лучи. / О.Д. Хвольсон - Петроград: Типография "Красный Печатник", 1923. - 173 с.
7. Юшин В.Д. Методы контроля и анализа веществ: учеб. пособие (конспект лекций). / Юшин В.Д., Бунова - Самара: Издательство СГАУ, Б.г. - 52с.; нет.
8. Ищенко А. А. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества. / А. А. Ищенко, Г. В. Гиричев, Ю. И. Тарасов - М.: Физматлит, 2012. - 614 с.: ил.
9. Лосев Н. Ф. Основы рентгеноспектрального флуоресцентного анализа. / Н. Ф. Лосев, А. Н. Смагунова - М.: Химия, 1982. - 208 с.
10. Тиного И. Физическая химия: принципы и применение в биологических науках. / И. Тиного и др.; пер. с англ. Е. Р. Разумовой ; под ред. В. И. Горшкова - М.: Техносфера, 2005. - 743 с.
11. Мильбурн Г. Рентгеновская кристаллография. / Г. Мильбурн; пер. с англ. Ю. Н.

Чиргадзе; под ред. Н. С. Андреевой - М.: Мир, 1975. - 256 с.

12. Камаева И. Г. Расчеты в рентгенофазовом анализе: учеб. пособие для вузов. / И. Г. Камаева; М-во высш. и сред. спец. образования РСФСР; Алтайский гос. ун-т - Барнаул: Алтайский гос. ун-т, 1980. - 100 с.

13. Рентген В.К. О новом роде лучей. / В.К. Рентген - М. Л.: Государственное технико-теоретическое изд-во, 1933. - 112 с.

14. Жданов Г.С. Основы рентгеновского структурного анализа. / Г.С. Жданов - М. Л.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1940. - 443 с.

15. Хейкер Д.М. Рентгеновская дифрактометрия. / Д.М. Хейкер; Зевин Л. С - Москва: Гос. изд-во физико-математической лит., 1963. - 191 с.

16. Рентгеновская дифрактометрия. / М.Г. Исаенкова; Перлович Ю. А; Скрытный В. И; Соколов Н. А; Яльцев В. Н - Москва: МИФИ, 2007. - 60 с.

17. Тамм И.Е. Рентгеновские лучи. / И.Е. Тамм - М. Л.: Государственное изд-во, 1927. - 111 с.

18. Винтайкин Б.Е. Рентгеновский фазовый анализ: методические указания к лабораторной работе Р-1 по курсу "Физика твердого тела". / Б.Е. Винтайкин; Кириллов И. В; Дементьева О. Ю - Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. - 16 с.

19. Жданов Г.С. Рентгеновы лучи. / Г.С. Жданов - М. Л.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1949. - 33 с.

20. Седлецкий И.Д. Рентгенографические таблицы для определения коллоидных минералов почв. / И.Д. Седлецкий - М. Л.: Изд-во Акад. наук СССР, 1941. - 41 с.

21. Рентгенографическое определение макронапряжений. / М.Г. Исаенкова; Перлович Ю. А; Скрытный В. И; Яльцев В. Н - Москва: МИФИ, 2007. - 48 с.

22. Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ. / А.И. Китайгородский - М. Л.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1950. - 650 с.

23. Болоздыня А. И. Детекторы ионизирующих частиц и излучений: принципы и применения.: [учеб. пособие для вузов]. / А. И. Болоздыня, И. М. Ободовский - Долгопрудный: Интеллект, 2012. - 204 с.: ил.

#### **в) ресурсы сети "Интернет"**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_fmd.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_fmd.php)).

2. Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов: 10202 записей, в том числе уникальных по имени минерала: 4280 (<http://database.iem.ac.ru/mincryst>)

3. Химический факультет МГУ Д.Ю.Пущаровский Рентгенография минералов (<http://www.chem.msu.su/rus/books/mineral/welcome.html>).

4. Лаборатория кристаллохимии. Учебные материалы по курсу кристаллохимии (<http://www.chem.msu.su/rus/lab/phys/cryschem/lectures/index.html>).

5. Учебные материалы по кристаллохимии. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.su/rus/cryst/welcome1.html>).

6. Химический факультет МГУ. Лаборатория кристаллохимии. Полезные ссылки (<http://www.chem.msu.su/rus/lab/phys/cryschem/links/index.html>).

7. Геологический факультет МГУ. Кафедра кристаллографии и кристаллохимии (<http://cryst.geol.msu.ru/courses/rgrf>).

8. Кафедра кристаллографии СПбГУ (<http://crystal.geology.spbu.ru>).

## **8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения практических занятий (семинаров);
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде ЯрГУ.

Аудиторный фонд физического факультета.

Мультимедийный проектор.

Оборудование Центра коллективного пользования «Диагностика микро- и наноструктур»

Лаборатория "Рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа" ЦКП ДМНС с дифрактометром ARL X'TRA с соответствующим вспомогательным оборудованием, расходные материалы и лабораторные инструменты.

Компьютерные классы с доступом в Интернет.

Библиотека университета.

Автор:

Доцент базовой кафедры  
нанотехнологий в электронике, д.ф.-м.н.  
*должность, ученая степень*

О.С. Трушин  
*И.О. Фамилия*

\_\_\_\_\_ *подпись*



**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ»**  
(наименование дисциплины)

**Фонд оценочных средств  
для проведения текущей и промежуточной аттестации студентов  
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания или иные материалы,  
необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,  
характеризующих этапы формирования компетенций**

**1.1 Контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущей аттестации**

**Некоторые варианты устных опросов:**

**Тема №1**

Явление экстинкции. Распространенные применения характеристического рентгеновского излучения. Природа белого рентгеновского излучения.

**Тема №2**

Материалы рентгеновской трубки ARL X'TRA. Тип детектора ARL X'TRA. Оптимальный режим работы рентгеновской трубки. Геометрия фокусировки.

**Тема №3**

Условие Брэгга-Вульфа. Сильные и длинные линии. База данных ICDD. Смысл метки качества. Символы Пирсона. Минимальный предел обнаружения фазы. Методы Лауэ, Дебая-Шерера, вращения. Метод Ритвельда

**Тема №4**

Смысл фактора Лоренца, температурного фактора, структурного фактора, поляризационного фактора, атомного фактора, фактора повторяемости.

**Тема №5**

Область когерентного рассеяния. Полуширина. Микронапряжения. Рентгеноаморфный предел области когерентного рассеяния. Сравнение функций Гаусса, Лоренца, Войта, Пирсона.

**Тема №6**

R-фактор. Систематические, интегральные и зональные погасания. Критерии устойчивости структуры. Коэффициент упаковки. Метод Фурье.

**Тема №7**

Явление текстуры. Правило Вегарда. Микроструктура металлов. Аустенит и мартенсит. Ближний и дальний порядок

**Темы лабораторных работ:**

1. Определение природы паразитных линий дифрактограмм монокристаллического кремния.
2. Основы получения экспериментальных данных и их обработки, работы с прибором
3. Идентификация дифрактограмм однофазного и двухфазного образцов
4. Исследование поведения интенсивности на выбранных образцах
5. Определение размер областей когерентности
6. Уточнение параметров решетки выбранных образцов
7. Оценка химического состава выбранных образцов

## **1.2 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

Зачет выставляется по итогам текущей аттестации.

### **Правила выставления оценки на зачете**

В билеты на зачет включается два теоретических вопроса. На подготовку к ответу дается не менее 1 часа.

По итогам зачета выставляется одна из оценок: «зачтено», «не зачтено».

**Оценка «Зачтено»** выставляется студенту, который демонстрирует глубокое и полное владение содержанием материала и понятийным аппаратом курса «Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ»; осуществляет межпредметные связи; умеет связывать теорию с практикой. Студент дает развернутые, полные и четкие ответы на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы, соблюдает логическую последовательность при изложении материала.

**Оценка «Не зачтено»** выставляется студенту, который демонстрирует разрозненные, бессистемные знания; беспорядочно и неуверенно излагает материал; не умеет выделять главное и второстепенное, не умеет соединять теоретические положения с практикой, не устанавливает межпредметные связи; допускает грубые ошибки при определении сущности раскрываемых понятий, явлений, вследствие непонимания их существенных и несущественных признаков и связей; дает неполные ответы, логика и последовательность изложения которых имеют существенные и принципиальные нарушения, в ответах отсутствуют выводы. Дополнительные и уточняющие вопросы экзаменатора не приводят к коррекции ответов студента. На основную часть дополнительных вопросов студент затрудняется дать ответ или дает неверные ответы.

Оценка «Не зачтено» выставляется также студенту, который взял билет, но отвечать отказался.

## **Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ»**

### **Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ» являются лекции. По большинству тем предусмотрены лабораторные занятия, на которых происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным лабораторным задачам и отработка навыков работы с методом рентгеновской дифракции.

Для успешного освоения дисциплины очень важно понимание действий, совершаемых во время выполнения лабораторных работ, как в лаборатории, так и самостоятельно в качестве домашних заданий. Лабораторные работы выполняются под наблюдением преподавателя, при необходимости по наиболее трудным темам проводятся дополнительные консультации. Основная цель выполнения лабораторных работ - помочь усвоить основные принципы метода рентгеновской дифракции. Для выполнения всех лабораторных работ необходимо знать и понимать лекционный материал. Поэтому в процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, лабораторных занятиях или из учебной литературы.

Большое внимание должно быть уделено выполнению домашней работы. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются лабораторные задачи, дополняющие и продолжающие отработанные непосредственно в лаборатории.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала, приобретенных практических навыков работы и проведения расчетов, в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде защиты лабораторных работ (в лаборатории).

Зачет принимается по итогам работы в семестре, принятым отчетам по лабораторным работам.

Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины «Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ» без самостоятельного выполнения студентом всех этапов лабораторных работ не просто. Поэтому посещение всех лабораторных занятий является совершенно необходимым. Без вовлеченности в приближенный к реальному исследовательский процесс в течение семестра освоить дисциплину вряд ли возможно.

Отчеты по лабораторным работам оформляются в соответствии с ГОСТ 2.104, ГОСТ 2.321, ГОСТ 7.1, ГОСТ 7.32, ГОСТ 21.101.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

Очень полезными для самостоятельной работы являются следующие англоязычные ресурсы:

1. X-Ray Transition Energies Database  
(<https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayTrans/Html/search.html>)
2. Solid State Structures Based on Close Packing  
([https://scilearn.sydney.edu.au/fychemistry/iChem/solid\\_state.shtmHtabM](https://scilearn.sydney.edu.au/fychemistry/iChem/solid_state.shtmHtabM))
3. SURFACE EXPLORER Version 2, based on BALSAC, (C) Klaus Hermann (FHI)  
(<http://surfexp.fhi-berlin.mpg.de>).
4. Torsion Explorer - an easy to use tool to learn about molecule conformations

(<http://www.openmolecules.org/torsionexplorer/index.html>).

5. DataWarrior - an open-source data visualization and analysis program with embedded chemical intelligence (<http://www.openmolecules.org/datawarrior/index.html>).

6. The "FPSM method" - a Rietveld like fitting procedure to test all possible crystal structures from a Database, rank them and find the more probable in your diffraction pattern (<http://cod.iutcaen.unicaen.fr>)

7. This mineral database was the first full mineral database on the Internet (<http://athena.unige.ch/athena/mineral/mineral.html>).

8. American Mineralogist Crystal Structure Database (<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>).

9. Information Resources on Inorganic Chemistry (<http://en.irc.imet-db.ru/DB.asp>)

10. Chemistry, Structures & 3D Molecules - a visual and interactive website showcasing the beautiful world (<http://www.3dchem.com/inorganic.asp>).

11. General Interest Chemistry Sites; Periodic Table; Labview; Spectroscopy; Bonding; Physical Properties; Computational Chemistry; Analytical Techniques; Mathematics and Trigonometric Identities ; Constants and Conversions ; Error Analysis; Miscellaneous (<http://www.unf.edu/~michael.lufaso/chemistry.html>).

12. Search interface for Solids (<http://www.chemeddl.org/resources/models360/solids.php>).

13. The Materials Project - open web-based access to computed information on known and predicted materials as well as powerful analysis tools to inspire and design novel materials (<https://www.materialsproject.org>)

14. The FACT-Web programs - free but very limited interaction with FactSage (<http://www.crct.polymtl.ca/factweb.php>)

15. University of Colorado; Mineral Structure Data (<http://ruby.colorado.edu/~smyth/min/minerals.html>)

16. MITOPENCOURSEWARE; MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY (<https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering>).

17. Advanced Certificate in Powder Diffraction on the Web; School of Crystallography, Birkbeck College, University of London (<http://pd.chem.ucl.ac.uk/pdnn/pdindex.htm>).

18. Powder Diffraction File: Overview; x-ray diffraction data. includes basic properties of elements and compounds; references ; Lehigh University Libraries - Library Guides (<http://libraryguides.lehigh.edu/powder>)

19. Международный центр дифракционных данных (<http://www.icdd.com>).

Для самостоятельного подбора литературы в библиотеке ЯрГУ рекомендуется использовать:

**1. Личный кабинет** ([http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_login.php](http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_login.php)) дает возможность получения on-line доступа к списку выданной в автоматизированном режиме литературы, просмотра и копирования электронных версий изданий сотрудников университета (учеб. и метод. пособия, тексты лекций и т.д.) Для работы в «Личном кабинете» необходимо зайти на сайт Научной библиотеки ЯрГУ с любой точки, имеющей доступ в Internet, в пункт меню «Электронный каталог»; пройти процедуру авторизации, выбрав вкладку «Авторизация», и заполнить представленные поля информации.

**2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ** ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)) содержит более 2500 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете. Доступ в сети университета, либо по логину/пароллю.

### **3. Электронная картотека «Книгообеспеченность»**

([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_bookreq\\_fmd.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_bookreq_fmd.php)) раскрывает учебный фонд научной библиотеки ЯрГУ, предоставляет оперативную информацию о состоянии книгообеспеченности дисциплин основной и дополнительной литературой, а также цикла дисциплин и специальностей. Электронная картотека «Книгообеспеченность» доступна в сети университета и через Личный кабинет.