

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»  
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет**  
**Кафедра физических методов исследования твёрдого тела**



**Рабочая программа дисциплины**  
**МЕТОДЫ КРИСТАЛЛОСТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ 2**

Направление подготовки: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): **Физика. Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения **Очная**

| Семестр                                                                     | Общий<br>объем | Виды учебных занятий (в часах)                    |                         |                           |                                                            | Промежуточная аттестация (в часах)                            |                                                   |       |                               |         |
|-----------------------------------------------------------------------------|----------------|---------------------------------------------------|-------------------------|---------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|-------|-------------------------------|---------|
|                                                                             |                | Контактная работа обучающихся<br>с преподавателем |                         |                           | Самостоятельная ра-<br>бота, не включая пе-<br>риод сессии | Самостоятельная<br>подготовка к проме-<br>жуточной аттестации | Контактная работа<br>обучающихся с преподавателем |       |                               |         |
|                                                                             |                | Лекции                                            | Практические<br>занятия | Лабораторные за-<br>нятия |                                                            |                                                               | Консультации                                      | Зачет | Дифференциро-<br>ванный зачет | Экзамен |
| 1                                                                           | 2              | 3                                                 | 4                       | 5                         | 6                                                          | 7                                                             | 8                                                 | 9     | 10                            | 11      |
| 2                                                                           | 72             | 16                                                | 16                      |                           | 18                                                         | 18                                                            | 2                                                 |       |                               | 2       |
| Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них:<br>- контактная работа 36 часов |                |                                                   |                         |                           |                                                            |                                                               |                                                   |       |                               |         |
| Компетенции ПК-1                                                            |                |                                                   |                         |                           |                                                            |                                                               |                                                   |       |                               |         |

Ответственный за образовательную программу  
д.ф.-м.н., проф.

С. В. Цыбуля

Новосибирск, 2026

## Содержание

|                                                                                                                                                                                                                       |   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. ....                                                                         | 3 |
| 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. ....                                                                                                                                                       | 5 |
| 3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу. .... | 6 |
| 4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. ....                                                           | 6 |
| 5. Перечень учебной литературы. ....                                                                                                                                                                                  | 7 |
| 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....                                                                                                                                | 8 |
| 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....                                                                                                     | 8 |
| 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. ....                                                                                                   | 8 |
| 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....                                                                                                           | 8 |
| 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. ....                                                                                                                | 9 |

# 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Дисциплина «Методы кристаллоструктурных исследований 2» получения студентами углубленных знаний о дифракционных методах исследований кристаллических структур.

Курс «Методы кристаллоструктурных исследований 2» является логическим продолжением курса «Методы кристаллоструктурных исследований 1» и опирается, в первую очередь, на него. В рамках курса как монокристалльные, так и порошковые методы рассматриваются углубленно. Студенты знакомятся с нестандартными и трудными случаями расшифровки и уточнения кристаллических структур с помощью метода монокристалльного рентгеноструктурного анализа, рассматриваются примеры расшифровки структур в случае двойникования, разупорядочения, наличия модуляций, определение абсолютной структуры. Подробно рассматриваются возможности метода порошковой дифракции для уточнения, индентирования и расшифровки структуры. В рамках курса также будет рассмотрена дифракция от аперриодических кристаллов и анализ влияния внешних воздействий (температура, давление, электромагнитное поле, облучение светом и др.) на вещество. Учащиеся по согласованию с преподавателями могут использовать для обучения как примеры, подобранные преподавателями, так и дифракционные данные, полученные ими в ходе своей научно-исследовательской практики.

Основной целью изучения дисциплины является освоение студентами дифракционных методов исследования кристаллических веществ на углубленном уровне и умение применять полученные знания для получения структурной информации при анализе реальных и не рутинных дифракционных данных, полученных как с использованием монокристалльных, так и порошковых образцов. После освоения дисциплины студент должен владеть методами расшифровки кристаллических структур на «продвинутом» уровне.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции)                                                                                                                                                                               | Индикаторы                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>ПК-1</b> Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | <b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.<br><b>ПК 1.2</b> Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | <b>Знать</b> учебный материал с требуемой степенью научной точности и полноты; на высоком уровне: математический аппарат, который используется для рентгеноструктурного анализа «реальных» монокристаллов, в которых наблюдается разупорядочение, двойникование, дефекты упаковки; математический аппарат, использующийся при расшифровке структур по порошку; основные дифракционные явления и особенности проведения дифракционного эксперимента для «реальных» кристаллов; актуальные методы анализа дифракционных данных для «реальных» и дефектных материалов; методы расчета дифракционных картин от объектов с различной упорядоченностью; основные закономерности формирования дифракционных картин от различных объектов; |

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-------------------------------------------------------------|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                             |            | <p>особенности отдельных узлов современных дифрактометров.</p> <p><b>Уметь</b> выстраивать взаимосвязи между структурными данными и данными других физических методов исследования; знать приемы расшифровки структур «реальных» твёрдых тел – дефектных и модулированных кристаллов, разупорядоченных фаз; подбирать метод исследования сложных «реальных» структур; решать прикладные задачи на основе рентгеноструктурных данных; проводить научные изыскания методами кристаллоструктурных исследований; оценивать изменения в выбранной области в связи с разработками нового программного обеспечения и появления новых коллективных центров для проведения таких исследований; выявлять ключевые проблемы структурного анализа для конкретного материала; организовать проведения необходимых дифракционных измерений, используя наиболее оптимальную приборную базу; оценивать и анализировать результат, полученный в ходе проведения эксперимента; устанавливать точность и полноту полученных данных.</p> <p><b>Владеть</b> навыками самостоятельной работы со специализированной литературой; навыками решения задач рентгеноструктурного анализа, в том числе, расшифровка двойниковых структур, исследование модулированных фаз и разупорядоченных систем, на основе приобретенных знаний, умений, навыков; приемами обработки и извлечения структурной информации с помощью современного программного обеспечения (ПО); статисти-</p> |

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------------------------|------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                             |            | ческими методами для анализа достоверности полученных решений; навыками работы с современными программами обработки дифракционных данных, с базами структурных и порошковых данных; необходимой информацией из современных отечественных и зарубежных источников в области исследования материалов; методами расшифровки структур различных «реальных» материалов; экспериментальными навыками для проведения научного исследования дифракционными методами. |

Занятия проводятся в лекционной форме и в форме практических занятий с использованием информационных технологий. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме с обсуждением лекционного материала на конкретных примерах. Часть заданий предполагает работу в команде. Часть заданий выполняется в режиме индивидуального обучения. Задания для студентов составляются на основе реальных недавно решенных научных задач.

Обратная связь обеспечивается тем, что лектор ведет все практические занятия и может оперативно скорректировать лекционный курс в зависимости от полученных результатов в усвоении материала. Практические занятия происходят в компьютерном классе, где студенты самостоятельно и в группах выполняют обработку экспериментальных данных, полученных в ходе решения научных задач лекторами курса. Студенты знакомятся с углубленными особенностями проведения дифракционного эксперимента на рентгеновских дифрактометрах.

Важной формой обучения является прием практических заданий, проводимых в форме беседы преподавателя со студентом, в которую при желании может участвовать любой студент группы. Здесь он может получить ответы на все интересующие его вопросы по предмету. Проводится контроль выполнения практических заданий и усвоения теоретического материала, обсуждение и критический анализ полученной информации.

Все преподаватели, участвующие в курсе «Методы кристаллоструктурных исследований 2», являются профессиональными исследователями в области химии твердого тела и кристаллохимии. Практические занятия в ряде случаев проводятся аспирантами и научными сотрудниками НГУ, ИК и других институтов СО РАН. В связи с этим, в курсе зачастую используются научные результаты, полученные самим лектором, либо его коллегами.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Для успешного освоения курса «Методы кристаллоструктурных исследований 2» студенты должны пройти курс «Методы кристаллоструктурных исследований 1» и обладать знаниями по электродинамике, физике и химии атомов и молекул, основам кристаллографии и структурного анализа, введении в рентгенографию поликристаллов, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисления, численные методы решения систем линейных уравнений и др.). Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору по направлению подготовки

03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Он должен предшествовать прохождению производственной практики (НИР) и выполнению квалификационной работы магистранта, т.к. дает необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения рентгеноструктурных исследований, необходимых для проведения исследований, связанных со структурой и свойствами твердого тела.

**3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.**

Трудоемкость дисциплины составляет: 2 зачётные единицы, 72 часа.

Форма промежуточной аттестации: 2 семестр – экзамен.

| №  | Вид деятельности                     | Семестр |
|----|--------------------------------------|---------|
|    |                                      | 1       |
| 1  | Лекции, ч                            | 16      |
| 2  | Практические занятия, ч              | 16      |
| 3  | Лабораторные занятия, ч              | -       |
| 4  | Занятия в контактной форме, ч из них | 36      |
| 5  | аудиторных занятий, ч                | 32      |
| 6  | в электронной форме, ч               | -       |
| 7  | консультаций, час.                   | 2       |
| 8  | промежуточная аттестация, ч          | 2       |
| 9  | Самостоятельная работа, час.         | 36      |
| 10 | Всего, ч                             | 72      |

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

**Программа и основное содержание лекций (16 часов)**

**Лекция 1.** Хиральность. Абсолютная конфигурация. Абсолютная структура. Центр инверсии. Методы определения центра инверсии. **(2 часа)**

**Лекция 2.** Разупорядочение в кристаллических структурах. Использование ограничений и дополнительных свободных переменных в уточнении. **(2 часа)**

**Лекция 3.** Двойникование. Виды двойникования. Мероэдрические, немероэдрические, псевдомероэдрические двойники. **(2 часа)**

**Лекция 4.** Аперiodические кристаллы и квазикристаллы. Модулированные, соразмерные и несообразные фазы. **(2 часа)**

**Лекция 5.** Профильный анализ в порошковой дифрактометрии. Знакомство с программным пакетом GSAS-II. Построение инструментального профиля. **(1 час)**

**Лекция 6.** Индексирование в порошковой дифрактометрии. **(2 часа)**

**Лекция 7.** Метод Ритвельда. Основные уравнения, уточняемые параметры и практические рекомендации. **(2 часа)**

**Лекция 8.** Количественный фазовый анализ. Метод внутреннего стандарта, метод добавок, метод калибровки. Безстандартный анализ методом Ритвельда. **(1 час)**

**Лекция 9.** Решение структуры по порошковым данным. **(2 часа)**

### **Программа практических занятий (16 часов)**

**Занятие 1.** Практические приемы определения абсолютной структуры кристаллов органических, металлоорганических и неорганических соединений. **(2 часа)**

**Занятие 2.** Практические приемы расшифровки кристаллических структур с разупорядочением. Беспорядок замещения, позиционное разупорядочение, разупорядочение молекул растворителя. **(2 часа)**

**Занятие 3.** Практические приемы расшифровки двойников. Определение закона двойникования, долей компонентов двойника. **(2 часа)**

**Занятие 4.** Практические приемы расшифровки структур аперiodических кристаллов. Знакомство с программным пакетом JANA. **(2 часа)**

**Занятие 5.** Профильный анализ в порошковой дифрактометрии. Знакомство с программным пакетом GSAS-II. Построение инструментального профиля. **(1 час)**

**Занятие 6.** Практические приемы проведения автоматического индицирования. **(2 часа)**

**Занятие 7.** Факторы недостоверности, ограничения, корреляция между параметрами в методе Ритвельда. Уточнение заселённости позиций в твердых растворах. Анализ полученных результатов. Практическая работа по уточнению структуры методом Ритвельда в программном пакете GSAS-II. **(2 часа)**

**Занятие 8.** Количественный фазовый анализ. Метод внутреннего стандарта, метод добавок, метод калибровки. Безстандартный анализ методом Ритвельда. **(1 час)**

**Занятие 9.** Методы «global optimization» для решения структуры по данным порошковой дифракции: общая схема; алгоритм «simulated annealing». **(2 часа)**

### **Самостоятельная работа студентов (36 часов)**

| Перечень занятий на СРС                                      | Объем, час |
|--------------------------------------------------------------|------------|
| Подготовка к практическим занятиям.                          | 12         |
| Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 6          |
| Подготовка к экзамену                                        | 18         |

### **5. Перечень учебной литературы.**

1. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. школа, 1989, ISBN 5-06-000074-5 (2 экз.)
2. Асланов Л.А. Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. М.: Изд. МГУ. 1983. - 288 с. (3 экз.)

## **6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.**

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Цыбуля С. В. Введение в структурный анализ нанокристаллов: учебное пособие: [для магистрантов Физ. фак. НГУ] / С.В. Цыбуля, С.В. Черепанова; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Физ. фак., Каф. физ. методов исследования твёрдого тела, Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2009. - 87 с.
2. Громилов С. А. Введение в рентгенографию поликристаллов. Учеб.-метод. пособие. – Новосибирск: НГУ, 2009. – 54 с.

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

### **7.1 Современные профессиональные базы данных**

Кембриджский банк структурных данных CCDC CSD  
База данных ICSD PDF-2 (демонстрационная версия)

### **7.2. Информационные справочные системы**

Не используются.

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Для изучения дисциплины требуется специализированное программное обеспечение, распространяемое свободно и бесплатно для студентов и преподавателей: Shelx Suite, ShelXle, Mercury, GSAS.

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

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими 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 в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

## **10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.**

### **10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине**

#### ***Текущий контроль***

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем проверки заданий, самостоятельно подготовленных магистрантами на практических занятиях.

#### ***Промежуточная аттестация***

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в области углубленного понимания принципов кристаллоструктурных исследований в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Он проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

**Таблица 10.1**

| <b>Код компетенции</b> | <b>Индикатор</b>                                                                                                                                                                     | <b>Результат обучения по дисциплине</b>                                                                                                                                                                                                                                                | <b>Оценочное средство</b>   |
|------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| <b>ПК-1</b>            | <b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от | <b>Знать</b> учебный материал с требуемой степенью научной точности и полноты; на высоком уровне: математический аппарат, который используется для рентгеноструктурного анализа «реальных» монокристаллов, в которых наблюдается разупорядочение, двойникование, дефекты упаковки; ма- | Выполнение заданий, экзамен |

|  |                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |  |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  | <p>специфики объекта исследования.</p> <p><b>ПК 1.2</b> Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p> | <p>тематический аппарат, использующийся при расшифровке структур по порошку; основные дифракционные явления и особенности проведения дифракционного эксперимента для «реальных» кристаллов; актуальные методы анализа дифракционных данных для «реальных» и дефектных материалов; методы расчета дифракционных картин от объектов с различной упорядоченностью; основные закономерности формирования дифракционных картин от различных объектов; особенности отдельных узлов современных дифрактометров.</p> <p><b>Уметь</b> выстраивать взаимосвязи между структурными данными и данными других физических методов исследования; знать приемы расшифровки структур «реальных» твёрдых тел – дефектных и модулированных кристаллов, разупорядоченных фаз; подбирать метод исследования сложных «реальных» структур; решать прикладные задачи на основе рентгеноструктурных данных; проводить научные изыскания методами кристаллоструктурных исследований; оценивать изменения в выбранной области в связи с разработками нового программного обеспечения и появления новых коллективных центров для проведения таких исследований; выявлять ключевые проблемы структурного анализа для конкретного материала; организовать проведения необходимых дифракционных измерений,</p> |  |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|

|  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |  |
|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  |  | <p>используя наиболее оптимальную приборную базу; оценивать и анализировать результат, полученный в ходе проведения эксперимента; устанавливать точность и полноту полученных данных.</p> <p><b>Владеть</b> навыками самостоятельной работы со специализированной литературой; навыками решения задач рентгеноструктурного анализа, в том числе, расшифровка двойниковых структур, исследование модулированных фаз и разупорядоченных систем, на основе приобретенных знаний, умений, навыков; приемами обработки и извлечения структурной информации с помощью современного программного обеспечения (ПО); статистическими методами для анализа достоверности полученных решений; навыками работы с современными программами обработки дифракционных данных, с базами структурных и порошковых данных; необходимой информацией из современных отечественных и зарубежных источников в области исследования материалов; методами расшифровки структур различных «реальных» материалов; экспериментальными навыками для проведения научного исследования дифракционными методами.</p> |  |
|--|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|

**10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Методы кристаллоструктурных исследований 2».**

**Таблица 10.2**

| Критерии оценивания результатов обучения                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Шкала оценивания                  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала,</li> <li>– точность и корректность применения терминов и понятий,</li> <li>– наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы.</li> </ul> <p>При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить не принципиальные неточности.</p> | <p><i>Отлично</i></p>             |
| <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала,</li> <li>– точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок,</li> <li>– наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок.</li> </ul>                                                     | <p><i>Хорошо</i></p>              |
| <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, а также затруднений при формулировке собственных суждений,</li> <li>– корректность применения терминов и понятий, с множественными ошибками,</li> <li>– наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.</li> </ul>                 | <p><i>Удовлетворительно</i></p>   |
| <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала,</li> <li>– грубые ошибки в применении терминов и понятий,</li> <li>– отсутствие ответов на дополнительные вопросы.</li> </ul>                                                                                                                                         | <p><i>Неудовлетворительно</i></p> |

### 10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

#### Примеры заданий на практических занятиях:

Задание 1. Определение абсолютной структуры кристалла и абсолютной конфигурации молекулы по дифракционным данным.

Расшифровка кристаллической структуры по выбору для нецентросимметричного кристалла с подготовкой краткого отчета о корректности расшифровки и достоверности структурной модели и ее соответствия наблюдаемой дифракционной картине. Определение параметра Флэка.

Задание 2. Расшифровка структуры кристалла, который представляет собой псевдомерздрический двойник.

Интегрирование первичных дифракционных данных для кристалла – псевдомерздрического двойника, определение закона двойникования, расшифровка кристаллической структуры.

Задание 3. Индицирование порошковых рентгенограмм.

Индицирование рентгенограмм соединений с кубической и моноклинной симметрией

Задание 4. Уточнение кристаллической структуры по порошковой рентгенограмме.

Уточнение структуры и распределения катионов в структуре железо-алюминиевого граната методом Ритвельда.

#### Примерные вопросы на экзамен

1. Понятие хиральности. Аномальное рассеяние. Параметр Флэка.
2. Двойникование. Виды двойникования. Мерздрические, немерждрические и др. двойники. Признаки, по которым можно распознать двойникование.
3. Виды разупорядочения в кристаллах. Влияние разупорядочения на дифракционную картину.
4. Аперидические кристаллы. Определение, классификация и примеры. Особенности описания строения аперидических кристаллов.
5. Профильный анализ. Описание фона, основные профильные функции, функция Каглиотти.
6. Понятие инструментальной функции. Методы построения. Метод фундаментальных параметров.
7. Методы Паули и Ле Бэйла.

- 
1. Определение абсолютной структуры и абсолютной конфигурации. Центр инверсии и методы определения наличия центра инверсии.
  2. Уточнение двойников в SHELXL.
  3. Определение наличия разупорядочения по дифракционным данным. Особенности расшифровки структур с разупорядочением.
  4. Критерии качества в профильном анализе.
  5. Индицирование неизвестной структуры в порошковой дифрактометрии. Автоматические методы индицирования.

6. Решение структур по порошковым дифракционным данным. Функция Паттерсона, прямые методы, методы прямого пространства, Charge flipping.

### **Пример билета на экзамен**

1. Метод Ритвельда. Математические основы. Порядок уточнения отдельных переменных.
2. Количественный фазовый анализ.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.