

**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



ТВЕРЖДАЮ
Декаан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины
МЕТОДЫ КРИСТАЛЛОСТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ 2

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный 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: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

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.	10
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	10
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	11
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	11
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	11
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	12

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 двойникового, разупорядочения, наличия модуляций, определение абсолютной структуры. Подробно рассматриваются возможности метода порошковой дифракции для уточнения, индирования 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
<p>ПК-1 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.</p>	<p>ПК 1.1 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.</p> <p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Знать 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;</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>особенности отдельных узлов современных дифрактометров.</p> <p>Уметь 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>Владеть 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 анали-</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		за 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

дению 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.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный 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: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, консультации, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: задания на практических занятиях;
- промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультации и экзамен) – 22 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

Работа с обучающимися в интерактивных формах составляет 16 часов (практические занятия).

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

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

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)					Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	Сам. работа во время промежуточной аттестации		
				Лекции	Практические занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Хиральность. Абсолютная конфигурация. Абсолютная структура. Центр инверсии. Методы определения центра инверсии.	1	3	2		1			
2.	Практические приемы определения абсолютной структуры кристаллов органических, металлоорганических и неорганических соединений.	2	3		2	1			
3.	Разупорядочение в кристаллических структурах. Использование ограничений и дополнительных свободных переменных в уточнении.	3	3	2		1			
4.	Практические приемы расшифровки кристаллических структур с разупорядочением. Беспорядок замещения, позиционное разупорядочение, разупорядочение молекул растворителя.	4	3		2	1			
5.	Двойникование. Виды двойникования. Мероэдрические, немероэдрические, псевдомероэдрические двойники.	5	3	2		1			
6.	Практические приемы расшифровки двойников. Определение закона двойникова-	6	3		2	1			

	ния, долей компонентов двойника.								
7.	Апериодические кристаллы и квазикристаллы. Модулированные, соразмерные и несоизмерные фазы.	7	3	2		1			
8.	Практические приемы расшифровки структур апериодических кристаллов. Знакомство с программным пакетом JANA.	8	3		2	1			
9.	Профильный анализ в порошковой дифрактометрии. Знакомство с программным пакетом GSAS-II. Построение инструментального профиля.	9	3	1	1	1			
10.	Индицирование в порошковой дифрактометрии.	10	3	2		1			
11.	Практические приемы проведения автоматического индицирования.	11	3		2	1			
12.	Метод Ритвельда. Основные уравнения, уточняемые параметры и практические рекомендации.	12	3	2		1			
13.	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.	13	3		2	1			
14.	Количественный фазовый анализ. Метод внутреннего стандарта, метод добавок, метод калибровки. Безстандартный анализ методом Ритвельда.	14	3	1	1	1			
15.	Решение структуры по порошко-	15	3	2		1			

	вым данным.								
16.	Методы «global optimization» для решения структуры по данным порошковой дифракции: общая схема; алгоритм «simulated annealing».	16	5		2	3			
17.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации.		18				18		
18.	Экзамен		4					2	2
Всего			72	16	16	18	18	2	2

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 несоизмеримые 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 аperiodических 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 индирования. (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.(1 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:

3. 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.
4. 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.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 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.	Знать 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; особенности отдельных узлов современных	Выполнение заданий, экзамен

	дифрактометров.	
<p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Уметь 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>Владеть 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</p>	<p>Выполнение заданий, экзамен</p>

	<p>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	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.

Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.2	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.
-----------------------------------	--------	--	--	--	---

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 молекул 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 псевдомероздрический двойник.

Интегрирование первичных дифракционных данных для кристалла – псевдомероздрического 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. Мероздрические, немероздрические 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. Индексирование неизвестной структуры в порошковой дифрактометрии. Автоматические методы индексирования.
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.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Методы кристаллоструктурных исследований 2»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного