

**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**  
**ВВЕДЕНИЕ В РЕНТГЕНОГРАФИЮ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ**

направление подготовки: **03.03.02 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
5	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

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

С. В. Цыбуля

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. ....	4
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. ....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. ....	5
5. Перечень учебной литературы. ....	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....	7
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины. ....	7
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. ....	8

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

Учебный курс «Введение в рентгенографию поликристаллов» предназначен для обучения студентов-физиков основам современных рентгендифрактометрических методов исследования кристаллов.

Основной целью освоения курса является ознакомление с: 1) способами получения рентгеновских лучей; 2) схемами получения дифракционной картины; 3) основными рентгенографическими характеристиками; 4) подходами к индцированию дифрактограмм; 4) уточнением параметров элементарной ячейки; 5) рентгеноструктурным анализом поликристаллов; 6) рентгенофазовым анализом; 7) количественным рентгенофазовым анализом.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p><b>ПК-1</b> Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p><b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p><b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p>	<p><b>Знать</b> основы теории возникновения тормозного и характеристического рентгеновского излучения, дифракции рентгеновских лучей на кристаллах; основы методик обработки данных и работы с современными базами рентгенографических данных, основы рентгенофазового анализа и определения параметров кристаллической структуры.</p> <p><b>Уметь</b> выполнять дифракционный эксперимент на моно- и поликристаллических образцах, а также проводить корректную обработку полученных дифракционных картин; получать числовые характеристики дифракционных картин, используя различные программные продукты, и использовать их для индцирования рентгенограмм, расчета параметров элементарной ячейки, качественного и количественного фазового анализа</p> <p><b>Владеть</b> навыками применения основных экспериментальных методик рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа поликристаллов, программными комплексами для обработки дифракционных данных, базами рентгенографических и кристаллохимических данных; программными комплексами для обработки дифракционных данных, базами рентгенографических и кристаллохимических данных..</p>

Курс «Введение в рентгенографию поликристаллов» читается классическим способом – проводятся лекции и практические занятия с постановкой промежуточных вопросов. При подаче материала лекционного курса используется мультимедийная техника. На экран выводятся определения, основные понятия, а также графические иллюстрации, помогающие наглядно подать материал. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме. Обсуждаются способы решения поставленных задач, оптимальность предложенных решений. Поощряется элемент соревновательности. Существенным элементом образовательных технологий является не только умение студента найти решение задачи, но и способность доходчиво донести его до всей аудитории. Умение ответить на вопросы сокурсников и преподавателя развивает навыки, которые будут необходимы в дальнейшей профессиональной деятельности студента. На контрольные вопросы студенты отвечают, как у доски, так и письменно. Каждому студенту предлагается свой вариант.

Всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов, материал лекционного курса увязывается с современными исследованиями в передовых отечественных и в мировых ускорительных центрах. Специально указываются темы, активно обсуждающиеся в текущей профессиональной научной литературе и планах дальнейших работ в институтах, в которых студенты проходят научную практику.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Курс «Введение в рентгенографию поликристаллов» читается в осеннем семестре 3 курса для бакалавров, обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика». Для его восприятия требуется предварительная подготовка студентов по электродинамике, кристаллографии, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисления, численные методы решения систем линейных уравнений и др.). Курс является одной из основных профессиональных дисциплин в блоке дисциплин по выбору реализуемых кафедрой физических методов исследования твёрдого тела. Он должен предшествовать прохождению производственной практики (НИР) и выполнению квалификационной работы бакалавра, 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. 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.

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
5	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: сообщения на 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.
- Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

#### 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 трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Рентгеновские лучи.	1	3	1	1	1	
2	Физические основы возникновения характеристического излучения.	2	3	1	1	1	
3	Электронная рентгеновская трубка.	3	3	1	1	1	
4	Взаимодействие X-лучей с веществом.	4	3	1	1	1	
5.	Спектр поглощения рентгеновских лучей.	5	3	1	1	1	
6.	Дифракция рентгеновских лучей.	6	3	1	1	1	
7.	Параметры элементарной ячейки.	7	3	1	1	1	
8.	Дифракция X-лучей на монокристалле.	8	3	1	1	1	
9.	Схема Брэгга-Брентано.	9	4	1	1	2	
10.	Схема Дебая-Шеррера.	10	4	1	1	2	
11.	Схема дифрактометра с широким параллельным пучком X-лучей.	11	3	1	1	1	
12.	Индексирование дифрактограмм.	12	3	1	1	1	
13.	Уточнение параметров элементарной ячейки.	13	3	1	1	1	
14.	Рентгеноструктурный анализ.	14	3	1	1	1	
15.	Качественный рентгенофазовый анализ	15	3	1	1	1	

16.	Количественный рентгенофазовый анализ.	16	3	1	1	1	
17.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18
18.	Консультации перед экзаменом		2				2
19.	Экзамен		2				2
<b>Всего</b>			<b>72</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>18</b>	<b>22</b>

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

- 1. Рентгеновские лучи.** История открытия X-лучей, принцип работы газоразрядной трубки, свойства X-лучей, тормозной спектр, оценка минимальной длины волны, соотношение энергии и длины волны X-лучей. (1 час)
- 2. Физические основы возникновения характеристического излучения.** Строение атома. Переходы электронов. (1 час)
- 3. Электронная рентгеновская трубка.** Потенциал возбуждения, фокус, проекция фокуса, мощность, яркость, старение, выбор напряжения. (1 час)
- 4. Взаимодействие X-лучей с веществом.** Поглощение X-лучей веществом, линейный и массовый коэффициенты поглощения, слой половинного поглощения, рентгеновская дефектоскопия. (1 час)
- 5. Спектр поглощения рентгеновских лучей.** Край поглощения,  $\beta$ -фильтр, эффект Комптона, Оже-электрон, когерентное рассеяние X-лучей. (1 час)
- 6. Дифракция рентгеновских лучей.** Уравнения Лауэ, уравнение Брэгга-Вульфа, спектрометр Брэггов, ошибки измерений межплоскостных расстояний. (1 час)
- 7. Параметры элементарной ячейки.** Индексы кристаллографических плоскостей, две формы записи уравнения Брэгга-Вульфа, дискретность дифракционной картины. (1 час)
- 8. Дифракция X-лучей на монокристаллах.** Условие образование дифракционного конуса. Лауэграмма. Виды дифракционных картин. (1 час)
- 9. Схема Брэгга-Брентано.** Основные типы дифрактометров. Окружность фокусировки, типы гониометров, расходимость первичного пучка, щель Соллера, требования к образцу,  $\theta$ -компенсирующая щель, юстировка гониометра, ошибки измерений. (1 час)
- 10. Схема Дебая-Шеррера.** Камера Дебая-Шеррера, коллимация первичного пучка, схемы получения дебаеграмм (в том числе с использованием пучка синхротронного излучения), обработка дебаеграммы, разрешение и светосила прибора, влияние поглощения, основные причины ошибок измерений. (1 час)
- 11. Схема дифрактометра с широким параллельным пучком X-лучей.** Геометрическая схема прибора, способы получения широкого параллельного пучка, использование монохроматора на отраженном пучке, точность измерений, примеры использования схемы. (1 час)
- 12. Индицирование.** Кристаллографические характеристики, 7 сингоний, квадратичная форма, основные трудности. Индицирование дифрактограммы кубической фазы. Рентгеновская плотность, число Авогадро, число формульных единиц. (1 час)
- 13. Уточнение параметров элементарной ячейки.** Общая схема, уточнение по одиночным отражениям, МНК, внешние и внутренние эталоны, критерии качества рентгенографических данных. (1 час)
- 14. Рентгеноструктурный анализ.** Условия полного погасания и ослабления дифракционных отражений, интенсивность дифракционного отражения, структурные факторы и амплитуды,

расчет теоретической дифрактограммы, основные этапы рентгеноструктурного анализа, полно-профильный анализ. (1 час)

**15. Качественный рентгенофазовый анализ.** Картотека PDF, объединение данных от моно- и поликристаллов, структурная информация, основные методы идентификации кристаллической фазы, чувствительность метода. (1 час)

**16. Количественный рентгенофазовый анализ.** Основные методики, корундовое число, чувствительность, факторы, влияющие на точность, ограничения. (1 час)

### Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1-16. По прочитанным лекциям (Кол-во часов - 16)

### 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. Громилов С.А. Введение в рентгенографию поликристаллов. Учеб.-метод. пособие. Новосибирск: НГУ, 2009. – 54 с.(8 экз)
2. Шаскольская М. П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984, 375 с. (26 экз.)

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. 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

1. <http://www.ccp14.ac.uk/index.html>
2. <http://www.iucr.org/iucr-top/>
3. *National Institute of Standard and Technology*. NIST, 1991. <https://www-s.nist.gov>.
4. Электронная база кристаллоструктурных данных для неорганических соединений ICSD. *Inorganic Crystal Structure Database*, ICSD, Release 2008, Fachinformationszentrum Karlsruhe, D-1754 Eggenstein–Leopoldshafen, Germany, 2008.

5. Международная электронная база порошковых рентгенографических данных PDF. *Powder Diffraction File. PDF-2.* // International Centre for Diffraction Data. USA.
6. Электронная база кристаллоструктурных данных (CSD) Кембриджского кристаллографического центра (CCDC) <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>
7. Открытая коллекция кристаллических структур органических, неорганических, металлоорганических соединений и минералов. <http://www.crystallography.net/cod/>

## **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.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

## **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 заслушивания сообщений студентов на занятиях в виде презентаций на выбранные темы.

#### ***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 части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области рентгенографии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен 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
<b>ПК 1.1</b> Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	<b>Знать</b> основы теории возникновения тормозного и характеристического рентгеновского излучения, дифракции рентгеновских лучей на кристаллах; основы методик обработки данных и работы с современными базами рентгенографических данных, основы рентгенофазового анализа и определения параметров кристаллической структуры.	Презентации, экзамен.
<b>ПК 1.2</b> Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	<b>Уметь</b> выполнять дифракционный эксперимент на моно- и поликристаллических образцах, а также проводить корректную обработку полученных дифракционных картин; получать числовые характеристики дифракционных картин, используя различные программные продукты, и использовать их для индентирования рентгенограмм, расчета параметров элементарной ячейки, качественного и количественного фазового анализа. <b>Владеть</b> навыками применения основных экспериментальных методик рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа поликристаллов, программными комплексами для обработки дифракционных данных, базами рентгенографических и кристаллохимических данных; программными комплексами для обработки дифракционных данных, базами рентгенографических и кристаллохимических данных.	Презентации, экзамен.

## 10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Введение в рентгенографию поликристаллов».

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.

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

### Темы презентаций на занятиях

1. Исследование температурной зависимости параметров элементарной ячейки неорганических фаз.
2. Уточнение параметров элементарной ячейки и кристаллохимическая оценка состава твердого раствора.
3. Уточнение кристаллической структуры новой неорганической фазы при известном аналоге.
4. Качественный и количественный рентгенофазовый анализ смесей поликристаллических фаз, в том числе представленных в микроколичествах.
5. Современные источники рентгеновского излучения.
6. Современные детекторы рентгеновского излучения.
7. Геометрические схемы современных дифрактометров для исследования поликристаллических веществ.
8. Использование схемы Дебая-Шеррера для исследования поликристаллических образцов, представленных в микроколичествах.
9. Современные подходы к индцированию дифрактограмм.
10. История создания и современный вид базы рентгенографических данных PDF.
11. Способы проведения количественного фазового анализа.
12. Возможности современных программ при определении и уточнении кристаллических структур поликристаллов.

## **Примерные вопросы на экзамен**

### **Тема №1 «Рентгеновские лучи»**

- 1.1. История открытия X-лучей.
- 1.2. Принцип работы газоразрядной трубки.
- 1.3. Свойства X-лучей.
- 1.4. Тормозной спектр, оценка минимальной длины волны.
- 1.5. Соотношение энергии и длины волны X-лучей.
- 1.6. Электронная рентгеновская трубка
- 1.7. Фокус и проекция фокуса рентгеновской трубки.
- 1.8. Мощность, яркость и старение рентгеновской трубки.
- 1.9. Выбор напряжения рентгеновской трубки.

### **Тема №2. «Физические основы возникновения характеристического излучения»**

- 2.1. Строение атома.
- 2.2. Серия рентгеновского излучения.
- 2.3. Главное квантовое число.
- 2.4. Причина возникновения дублета К-серии.
- 2.5. Потенциал возбуждения.

### **Тема 3. «Электронная рентгеновская трубка».**

- 3.1. Принцип работы электронной рентгеновской трубки (ЭРТ).
- 3.2. Потенциал возбуждения.
- 3.3. Характеристики фокуса ЭРТ. Проекция фокуса.
- 3.4. Мощность и яркость ЭРТ.
- 3.5. Основные причины выхода из строя. Старение ЭРТ.
- 3.6. Как выбирают напряжение ЭРТ.

### **Тема №4. «Взаимодействие X-лучей с веществом»**

- 4.1. Поглощение X-лучей веществом. Линейный и массовый коэффициенты поглощения.
- 4.2. Качественно сравните поглощение медного и молибденового характеристического излучения кремниевой пластинкой определенной толщины.
- 4.3. Как определяют слой половинного поглощения.
- 4.4. Рассчитайте защиту для ослабления первичного пучка до <1%.
- 4.5. Рентгеновская дефектоскопия.

### **Тема №5. Спектр поглощения рентгеновских лучей.**

- 5.1. Спектр поглощения. Край поглощения.
- 5.2. Принцип работы  $\beta$ -фильтра.
- 5.3. Выбор  $\beta$ -фильтра.
- 5.4. Эффект Комптона, Оже-электрон.
- 5.5. Когерентное рассеяние X-лучей.

### **Тема №6 «Дифракция рентгеновских лучей»**

- 6.1. Предпосылки к открытию дифракции рентгеновских лучей.
- 6.2. Оценки Эвальда

- 6.3. Вывод уравнения Лауэ.
- 6.4. Уравнение Брэгга-Вульфа.
- 6.5. Схема спектрометра Брэггов.
- 6.6. Две формы записи уравнения Брэгга-Вульфа.
- 6.7. Области регистрации  $d$  для разных  $\lambda$
- 6.8. Ошибки измерения  $d$ .
- 6.9. Отражение характеристического излучения от монокристаллической пластинки.
- 6.10. Образование дифракционных конусов для моно- и поликристалла.
- 6.11. С чем связана дискретность дифракционной картины?

#### Тема №7 «Параметры элементарной ячейки»

- 7.1. Индексы кристаллографических плоскостей.
- 7.2. Две формы записи уравнения Брэгга-Вульфа.,
- 7.3. Дискретность дифракционной картины.
- 7.4. Рентгенографические эталоны.

#### Тема №8 Дифракция X-лучей на монокристаллах.

- 8.1. Условие образования дифракционного конуса.
- 8.2. Лауэграмма.
- 8.3. Виды дифракционных картин.

#### Тема №9. «Схема Дебая-Шеррера»

- 9.1. Основные особенности схемы Дебая-Шеррера.
- 9.2. Камера Дебая-Шеррера.
- 9.3. Схема дифрактометра с широким параллельным пучком.
- 9.4. Коллимация первичного пучка.
- 9.5. Схемы получения дебаеграмм. Отличие схем «на прохождение» и «на отражение».
- 9.6. Обработка дебаеграммы.
- 9.7. Разрешение и светосила прибора.
- 9.8. Влияние поглощения.
- 9.9. Основные причины ошибок измерений.
- 9.10. Схема эксперимента на дифрактометре, оснащенном плоским двумерным детектором.
- 9.11. Основные требования к установке образца на прибор со схемой Дебая-Шеррера.

#### Тема №10. «Схема Брэгга-Брентано»

- 10.1. Схема Брэгга-Брентано.
- 10.2. Окружность фокусировки.
- 10.3. Антирассеивающая щель.
- 10.4. Эффект щели Соллера.
- 10.5. Типы гониометров.
- 10.6. Требования к образцу.
- 10.7. Изменение облучаемой площади образца.  $\theta$ -Компенсированные щели.
- 10.8. Преимущественная ориентация кристаллитов.
- 10.9. Основные этапы юстировки гониометра.
- 10.10. Основные причины ошибок измерений.
- 10.11. Преимущества использования широко расходящегося пучка.
- 10.12. Сравнение схем Брэгга-Брентано и Дебая-Шеррера.

#### Тема №11. «Схема дифрактометра с широким параллельным пучком X-лучей».

- 11.1. Геометрическая схема прибора.
- 11.2. Способы получения широкого параллельного пучка.
- 11.3. Использование монохроматора на отраженном пучке.
- 11.4. Точность измерений.
- 11.4. Примеры использования схемы.

#### Тема №12. «Индицирование».

- 12.1. Дать определение понятию «индицирование».
- 12.2. Параметры элементарной ячейки. 7 сингоний.
- 12.3. Квадратичная форма для кубической сингонии.
- 12.4. Индицирование с известными параметрами элементарной ячейки.
- 12.5. Основные трудности при индицировании с неизвестными параметрами элементарной ячейки.
- 12.6. Оцените возможное влияние преимущественной ориентации при проведении индицирования.
- 12.7. Возникновение систематических погасаний.
- 12.8. Индицирование дифрактограмм кубических фаз.
- 12.9. Рентгеновская плотность, число Авогадро, число формульных единиц.

#### Тема №13. «Уточнение параметров элементарной ячейки».

- 13.1. Индексы кристаллографических плоскостей.
- 13.2. Схема определения параметра ячейки на примере кубической сингонии.
- 13.3. Выбор одиночных линий для уточнения параметров элементарной ячейки.
- 13.4. Использование внешнего эталона.
- 13.5. Использование внутреннего эталона.
- 13.6. Калибровка гониометра в малых углах дифракции.
- 13.7. Комбинированный критерий качества рентгенографических данных.

#### Тема №14 «Рентгеноструктурный анализ».

- 14.1. Расшифровка структуры NaCl Брэггами.
- 14.2. Схема полного погасания и ослабления дифракционных отражений при появлении дополнительных атомов в примитивной кубической ячейке.
- 14.3. Интенсивность дифракционного отражения (основные факторы).
- 14.4. Основные этапы рентгеноструктурного анализа поликристаллов.
- 14.5. Требования к образцу при проведении РСТА.
- 14.6. Требования к проведению эксперимента.
- 14.7. Расчет теоретической дифрактограммы.
- 14.8. Суть полнопрофильного анализа.

#### Тема №15. «Качественный РФА»

- 15.1. История создания картотеки PDF.
- 15.2. Основные поля карточки PDF.
- 15.3. Что повлияло на успех картотеки PDF ?
- 15.4. Каким образом объединяются рентгенографические данные, полученные на моно- и поликристаллах?
- 15.5. Что понимают под структурной информацией?
- 15.6. Три основных метода идентификации кристаллической фазы по рентгенографическим данным.
- 15.7. Чувствительность качественного РФА.

## Тема №16.«Количественный РФА»

- 16.1. Дайте определение термину "корундовое число".
- 16.2. Каким образом преимущественная ориентация влияет на результаты количественного РФА?
- 16.3. Назовите минимум три математические функции, используемые для описания профилей дифракционных пиков.
- 16.4. Дайте определение понятию "разностная кривая".
- 16.5. Назовите методики проведения количественного РФА не требующие знания кристаллической структуры компонентов смеси.
- 16.6. Назовите основные факторы, влияющие на точность количественного РФА.
- 16.7. Назовите основные факторы, ограничивающие область применения метода количественного РФА.

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 «Введение в рентгенографию поликристаллов»  
по направлению подготовки 03.03.02 Физика  
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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