

**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
Декан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины
ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

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.	8
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.	9
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 «Основы кристаллографии и структурного анализа» представляет собой начальный курс кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, предназначенный для обучения студентов-физиков, специализирующихся в области физики конденсированного состояния вещества, включая разделы физики твердого тела, относящиеся к методам исследования структуры вещества.

Целью освоения курса является ознакомление студентов с 1) основными понятиями структурной кристаллографии; 2) операторным способом описания симметрии конечных фигур и бесконечных кристаллических решеток; 3) системами обозначений точечных и пространственных групп симметрии; 4) способами описания кристаллических структур; 5) основными положениями кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей; 6) методами и способами получения дифракционных картин; 7) теоретическими основами дифракционных методик определения кристаллической структуры.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 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>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p>ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p>ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>Знать основные понятия теории симметрии, системы обозначений точечных и пространственных групп симметрии, способы описания и представления кристаллических структур, основы кинематической теории дифракции рентгеновских;</p> <p>- основные современные методы рентгеноструктурного анализа, включая различные схемы проведения дифракционного эксперимента и различные подходы к установлению атомного строения неизвестных структур.</p> <p>Уметь строить атомные и полиэдрические модели кристаллических структур на основе справочных данных; решать задачи, связанные с преобразованиями кристаллографических координат, с взаимодействием операций симметрии, выводом правил погасания дифракционных пиков для кристаллов разной симметрии;</p> <p>- уметь рассчитывать теоретические рентгенограммы.</p> <p>Владеть международной кристаллографической системой обозначения точечных и пространственных групп симметрии и системой обозначений по Шенфлису;</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		- навыками работы с Интернациональными кристаллографическими таблицами и другими справочными материалами, необходимыми при выполнении структурных исследований..

Всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов, материал лекционного курса увязывается с современными исследованиями в области структурного анализа кристаллов, техники эксперимента, методам интерпретации дифракционных данных. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме. Специально указываются темы, активно обсуждающиеся в текущей профессиональной научной литературе и планах дальнейших работ в институтах, в котором студенты планируют проходить научную практику. Материал курса увязывается с общефизическими и математическими дисциплинами, изучаемыми студентами-физиками (электродинамика, высшая алгебра и т.д.) и спецкурсами, параллельно изучающимися по данной специальности (рентгенография поликристаллов, ИК-спектроскопия), а также лабораторными работами, выполняемыми в рамках отдельного спецпрактикума.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Основы кристаллографии и структурного анализа» реализуется в осеннем семестре 3-го курса для бакалавров, обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой физических методов исследования твердого тела. Для его восприятия требуется предварительная подготовка студентов по таким разделам физики и математики, как электродинамика, дифференциальное и интегральное исчисления, ряды Фурье, численные методы решения систем линейных уравнений, элементы теории групп и др. Он должен предшествовать выполнению квалификационной работы бакалавра по данной специализации, т.к. дает бакалавру необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения рентгеноструктурных исследований поли- и монокристаллов в рамках подготовки его квалификационной работы.

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: опрос по пройденному материалу на практических занятиях, контрольные работы;
- 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.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные 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.	Основные понятия кристаллографии	1-2	6	2	2	2	
2	Точечная симметрия кристаллов	3-6	12	4	4	4	
3	Пространственная симметрия кристаллических структур	7-10	12	4	4	4	
4	Основы кинематической теории дифракции	11-12	6	2	2	2	
5.	Физические основы структурного анализа	13-14	8	2	2	4	
6.	Основные этапы структурного анализа	15-16	6	2	2	2	
7.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18
8.	Консультации перед экзаменом		2				2
9.	Экзамен		2				2
Всего			72	16	16	18	22

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

Раздел 1. Основные понятия кристаллографии (2 часа)

Введение: понятие о симметрии, симметрия в науке и искусстве. Предмет и задачи кристаллографии и структурного анализа. Кристаллы и кристаллическая структура. Антисимметрия. Пространственная (трансляционная) решетка. Элементарная ячейка. Индексы узлов, узловых рядов и узловых плоскостей решетки. Основные формулы решеточной кристаллографии. Преобразования систем кристаллографических координат.

Раздел 2. Точечная симметрия кристаллов (4 часа)

Закрытые операции и элементы симметрии. Системы обозначений (международная и Шенфлиса). Матричный метод описания операций симметрии. Сочетание элементов симметрии. Некоторые теоремы о сочетании элементов. Теорема Эйлера. Понятие группы. Точечные группы симметрии для конечных фигур.

Совместимость закрытых операций симметрии с пространственной решеткой. Кристаллографические точечные группы. Кристаллические системы (сингонии), принципы классификации кристаллических систем. Понятие особого направления.

Раздел 3. Пространственная симметрия кристаллических структур (4 часа)

Решетки и ячейки Бравэ. Открытые операции и элементы симметрии. Операторный метод описания операций симметрии. Взаимодействие операций симметрии кристалла. Пространственные группы симметрии. Системы обозначений. Правильные системы точек (орбиты) пространственных групп симметрии.

Способы представления кристаллических структур. Атомные модели. Принцип плотнейшей упаковки. Гексагональная и кубическая плотнейшие упаковки. Построения координационных полиэдров. Принцип упаковки «ключ-замок».

Раздел 4. Основы кинематической теории дифракции (2 часа)

Дифракция рентгеновских лучей, нейтронов и электронов кристаллами. Источники рентгеновского излучения (рентгеновские трубки, синхротронное излучение). Рассеяние рентгеновских лучей электроном, атомом, группой атомов, кристаллом. Условия дифракции на пространственной решетке по Лауэ и по Брэггу, формула Брэгга-Вульфа.

Раздел 5. Физические основы структурного анализа (2 часа)

Обратная решетка. Сфера Эвальда. Интерференционное уравнение. Атомный фактор рассеяния. Электронная плотность. Структурная амплитуда и структурный фактор. Интенсивность дифракционных максимумов. Условия эксперимента: расходимость пучка, поглощение, поляризация.

Раздел 6. Основные этапы структурного анализа (2 часа)

Определение пространственной группы симметрии кристалла по дифракционным данным. Принцип Кюри-Неймана в применении к симметрии дифракционной картины. Дифракционные классы (Лауэ классы) симметрии. Систематические погасания рефлексов, определение типа

ячейки Бравэ и открытых элементов симметрии из условий погасания. Определение параметров решетки.

Фазовая проблема. Методы определения моделей кристаллических структур. Метод функции Патерсона. Прямые методы определения кристаллической структуры. Уточнение структурной модели, методы уточнения, критерии достоверности (R-фактор, критерий метода наименьших квадратов). Сравнительная характеристика дифракционных методов структурного анализа: рентгеноструктурный анализ, нейтронография, электронография.

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1. Элементы симметрии и операции симметрии. Операции симметрии 1-го и 2-го рода. Матричные представления операций симметрии. Преобразования системы координат и координаты симметрично связанных точек (решение задач). Операторы симметрии: симметрическое преобразование относительно оси, не проходящей через начало координат. (2 часа)

Занятие 2. Сочетания элементов симметрии (решение задач): пересечение двух плоскостей, пересечение оси четного порядка и плоскости, ось и проходящая вдоль нее плоскость, пересечение двух осей (теорема Эйлера). (2 часа)

Занятие 3. Пространственные группы симметрии. Системы обозначений. Открытые элементы симметрии: вид операторов. Сочетание открытых и закрытых элементов симметрии (решение задач). (2 часа)

Занятие 4. Пространственные группы симметрии. Знакомство с Интернациональными таблицами. Чертежи пространственных групп. Вывод операторов симметрии и построение чертежа по символу пространственной группы в Интернациональной системе. Определение кратности общих и частных позиций. (2 часа)

Занятие 5. Контрольная работа №1. (1 час)

Занятие 6. Геометрия кристаллической решетки и обратного пространства. Вывод квадратичных форм для любой сингонии. (2 часа)

Занятие 7. Правила погасания дифракционных отражений. Вывод правил погасания для центрированных ячеек, для винтовых осей, для плоскостей скользящего отражения. Индексирование рентгенограмм (пример кубической сингонии). (2 часа)

Занятие 8. Факторы повторяемости для дифракционных отражений на порошковых рентгенограммах. Изменения симметрии и дифракционных картин при фазовых переходах различного рода. Определение рентгеновской плотности. (2 часа)

Занятие 9. Контрольная работа №2. (1 час)

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	6
Подготовка к контрольным работам	6
Изучение теоретического материала по предыдущим лекциям и рекомендованной литературе	6
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

1. Чупрунов Е. В. Кристаллография. / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фадеев: Физматлит, 2000, 496 с. ISBN 5-94052-020-0 (и последующие переиздания). (6 экз.)
2. Порай-Кошиц М.Ф. Практический курс рентгеноструктурного анализа : учебное пособие для государственных университетов : [в 2 т.] / М. А. Порай-Кошиц. Москва : Изд-во МГУ, 1960.-(14 экз.)
3. Шаскольская М. П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984, 375 с.(26 экз.)
4. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений: [учеб. пособие для хим. спец. ун-тов] / М. А. Порай-Кошиц. М.: Высшая школа, 1989, 191 с. ISBN 5-06-000074-5/ (2 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.
2. Громилов С.А. Куратьева Н.В. Шубин Ю.В. Рентгенография кристаллов. Учеб.-метод. пособие. Новосибирск: ФФ НГУ, 2012.

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

Не используются.

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, занятий семинарского типа, 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.

Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем опроса в начале каждой лекции по материалам предыдущей лекции и проведения коротких самостоятельных работ в начале каждого семинара с решением типовых задач, разобранных на предыдущем семинаре. Кроме того, проводится две контрольные работы, предполагающие решение задач из разделов «Основы кристаллографии» и «Рентгеноструктурный анализ».

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 кристаллографии и рентгеноструктурного анализа 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
<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p>	<p>Знать основные понятия теории симметрии, системы обозначений точечных и пространственных групп симметрии, способы описания и представления кристаллических структур, основы кинематической теории дифракции рентгеновских;</p> <p>- основные современные методы рентгеноструктурного анализа, включая различные схемы проведения дифракционного эксперимента и различные подходы к установлению атомного строения неизвестных структур.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>
<p>ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области</p>	<p>Уметь строить атомные и полиэдрические модели кристаллических структур на основе справочных данных; решать задачи, связанные с преобразованиями кристаллографических координат, с взаимодействием операций симметрии, выводом правил погасания дифракционных пиков для кристаллов разной симметрии;</p> <p>- уметь рассчитывать теоретические рентгенограммы.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>
<p>ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>Владеть международной кристаллографической системой обозначения точечных и пространственных групп симметрии и системой обозначений по Шенфлису;</p> <p>- навыками работы с Интернациональными кристаллографическими таблицами и другими справочными материалами, необходимыми при выполнении структурных исследований.</p>	<p>Проведение контрольных работ, экзамен.</p>

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы кристаллографии и структурного анализа».

Таблица 10.2

Уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		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 1.3	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

Контрольная работа №1 по разделу «Основы кристаллографии»

Типы заданий:

- Вывести матрицы преобразований, соответствующие следующим операциям симметрии: 1) плоскость зеркального отражения; 2) поворот вокруг оси z на угол φ ; 3) центр инверсии; 4) инверсионный и зеркальный повороты на угол φ .
- Найти матрицу преобразования координат точки xyz вокруг оси 2-го порядка, параллельной оси z и пересекающей плоскость xy в точке $(0, p, 0)$.
- Установить связь между операциями симметрии, соответствующими инверсионным и зеркальным поворотам.
- Показать, что в кристалле не могут существовать поворотные оси 5-го и выше 6-го порядков.
- Вывести решетки Бравэ для всех кристаллических систем.
- Показать, какие элементы симметрии возникают при взаимодействии трансляции с 1) центром инверсии; 2) плоскостью зеркального отражения; 3) простыми поворотными осями 2, 3, 4 и 6-го порядков; 4) инверсионными осями 2, 3, 4 и 6-го порядков.

- Вывести в операторной форме все элементы пространственной группы симметрии на основе ее интернационального символа. Построить соответствующее графическое изображение пространственной группы (на примере групп моноклинной и ромбической сингоний).
- Рассчитать координаты правильной системы точек (орбиты) для заданной пространственной группы симметрии (на примере одной из групп моноклинной или ромбической сингоний). Определить частные положения, рассчитать кратность позиций атомов в общем и в частных положениях.

Примерный вариант контрольной работы

- Для элементов симметрии, обозначенных на рисунке, приведите матричное представление в той же системе координат. Являются ли представленные на рисунке элементы симметрии открытыми или закрытыми?

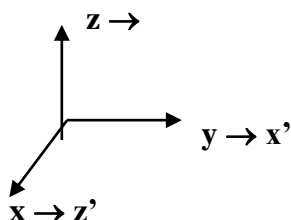


- Какие элементы симметрии соответствуют приведенным матричным операторам? Приведите графическое обозначение в той же системе координат. Являются ли эти элементы открытыми или закрытыми?

а)
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

б)
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

- В системе координат xyz группы симметрии имеют следующие символы **Cmcm**, **Pbca**, **Fm3**. Какие символы будут иметь те же группы, если произвести смену системы координат $xyz \rightarrow x'y'z'$ так, как это показано на рисунке?



- Нарисуйте проекцию xy следующей пространственной группы **Pna2₁**. К какой кристаллографической системе (сингонии) и кристаллографическому классу относится эта ПГС? Укажите кратность точек общего положения ПГС и их координаты. Выполняется ли для данной пространственной группы следующее соотношение параметров решетки (если нет – приведите правильное соотношение):

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

5. Даны три проекции и правильная система точек некой пространственной группы симметрии. К какой кристаллографической системе (сингонии) и кристаллографическому классу относится эта ПГС? Укажите ее символ. Запишите матричные элементы симметрии этой ПГС и координаты точек общего положения ПГС.

Контрольная работа №2 по разделу «Рентгеноструктурный анализ»
Типы заданий

1. Вывод правил погасания дифракционных отражений для случаев 1) центрированных решеток F, I, A, B, C типов; 2) для винтовых осей различных порядков; 3) для плоскостей скользящего отражения a, b, c, n, d типов, ориентированных различным образом по отношению к кристаллографическим осям.
2. Индексирование рентгенограммы для случая кубической сингонии.
3. Определение по погасаниям вариантов пространственных групп.
4. Генерация массива hkl для данной структуры с учетом погасаний.
5. Определение факторов повторяемости для рефлексов на порошковых рентгенограммах.
6. Определение возможных вариантов кристаллических структур при наличии данных о симметрии кристалла, его химическом составе и плотности.
7. Расчет дифракционной картины от порошкового образца после фазового перехода, связанного с искажением исходной ячейки (понижением симметрии).
8. Расчет дифракционной картины от порошкового образца при упорядочении твердых растворов (образование сверхструктур).

Вопросы на экзамен

Тема №1 «Основные понятия кристаллографии»

- 1.1. Предмет и задачи кристаллографии и структурного анализа.
- 1.2. Кристаллы и кристаллическая структура.
- 1.3. Понятие о симметрии. Антисимметрия.
- 1.4. Пространственная (трансляционная) решетка.
- 1.5. Элементарная ячейка.
- 1.6. Индексы узлов, узловых рядов и узловых плоскостей решетки.
- 1.6. Основные формулы решеточной кристаллографии.
- 1.7. Преобразования систем кристаллографических координат.

Тема №2 «Точечная симметрия кристаллов»

- 2.1. Закрытые операции и элементы симметрии.
- 2.2. Международная система обозначений элементов и операций симметрии.
- 2.3. Система обозначений по Шенфлису.
- 2.4. Операции симметрии 1-го и 2-го рода.
- 2.5. Инверсионные и зеркально-поворотные оси.
- 2.6. Точечные группы симметрии.
- 2.7. Системы обозначений точечных групп (международная и Шенфлиса).
- 2.8. Матричный метод описания операций симметрии.
- 2.9. Совместимость закрытых операций симметрии с пространственной решеткой.
- 2.10. Кристаллографические точечные группы. Кристаллические системы (сингонии).

Тема №3 «Пространственная симметрия кристаллических структур»

- 3.1. Решетки и ячейки Бравэ.
- 3.2. Открытые операции и элементы симметрии.
- 3.3. Операторный метод описания операций симметрии.
- 3.4. Взаимодействие операций симметрии кристалла.
- 3.5. Пространственные группы симметрии. Системы обозначений.
- 3.6. Правильные системы точек (орбиты) пространственных групп симметрии.
- 3.7. Способы представления кристаллических структур.

Тема №4 «Физические основы структурного анализа»

- 4.1. Рассеяние рентгеновских лучей электроном, атомом, группой атомов, кристаллом.
- 4.2. Условия дифракции на пространственной решетке по Лауэ и по Брэггу, формула Брэгга-Вульфа.
- 4.3. Обратная решетка. Сфера Эвальда.
- 4.4. Интерференционное уравнение.
- 4.5. Атомный фактор рассеяния.
- 4.6. Электронная плотность.
- 4.7. Структурная амплитуда и структурный фактор.
- 4.8. Интенсивность дифракционных максимумов.

Тема №5 «Основные этапы структурного анализа»

- 5.1. Определение пространственной группы симметрии кристалла.
- 5.2. Принцип Кюри-Неймана в применении к симметрии дифракционной картины.
- 5.3. Дифракционные классы (Лауэ классы) симметрии.
- 5.4. Систематические погасания рефлексов, определение типа ячейки Бравэ и открытых элементов симметрии из условий погасания.
- 5.5. Определение параметров решетки.
- 5.6. Фазовая проблема.
- 5.7. Методы определения моделей кристаллических структур.
- 5.8. Метод функции Патерсона.
- 5.9. Прямые методы.
- 5.10. Уточнение структурной модели, методы уточнения, критерии достоверности.
- 5.11. Сравнительная характеристика дифракционных методов структурного анализа: рентгеноструктурный анализ, нейтронография, электронография.

Пример экзаменационного билета

1. Международная система обозначений элементов и операций симметрии.
2. Условия дифракции на пространственной решетке по Лауэ и по Брэггу, формула Брэгга-Вульфа.
3. Практическое задание: определить кратность общей позиции (системы правильных точек) для заданной пространственной группы симметрии; указать частные позиции и их кратность.

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 «Основы кристаллографии и структурного анализа»
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