

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
ФГБОУ ВО «ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИКА

**СОГЛАСОВАНО**

**УТВЕРЖДАЮ**

Руководитель образовательной программы

Декан физико-математического факультета

\_\_\_\_\_/ Матиев А.Х.  
от « 21 » 05 2024г.

\_\_\_\_\_/ Кульбужев Б. С.  
от « 21 » 05 2024г.

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Основы рентгено-структурного анализа**

**Уровень высшего образования:** бакалавриат

**Направление подготовки (специальность):** 03.04.02 Физика

**Направленность ОПОП ВО:**

**Квалификация выпускника:** магистр

**Форма обучения:** очная

**Дисциплина в структуре ОПОП ВО:** базовая часть Блока 1 «Дисциплины»

**Тип дисциплины:** обязательная

**Наличие курсовой работы (проекта):** Нет

**Курс(ы) изучения дисциплины:** 1

**Семестр(ы) изучения дисциплины:** 1

Магас - 2024

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**  
**ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ**  
**ПО ДИСЦИПЛИНЕ Основы рентгено-структурного анализа**

**1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины**

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общепрофессиональных (ОПК-1, ОПК-4).

**2. Показатели оценивания компетенций**

В результате изучения дисциплины «Основы рентгеноструктурного анализа» обучающийся должен:

**знать:**

- ☐ фундаментальные понятия, законы, теории в области кристаллографии и дифракции;
- ☐ численные порядки величин, характерные для различных разделов физики;
- ☐ современные проблемы физики, химии, математики;
- ☐ основные методы рентгеноструктурного анализа кристаллов;
- ☐ основы кристаллохимии и кристаллофизики.

**уметь:**

- определять размеры ячейки, типа решетки и дифракционного класса кристалла;
- применять правило погасаний;
- определять тип решетки и пространственной группы симметрии при исследовании кристаллического порошка;
- использовать программы для определения кристаллических структур;
- определять интенсивность дифракционных отражений;
- анализировать структуры аморфных и дисперсных веществ

**владеть:**

- ☐ навыками освоения большого объема информации;
- ☐ культурой постановки и моделирования физических задач;
- ☐ навыками решения типовых задач и задач повышенной трудности теоретического и экспериментального плана с использованием методов вычислительной математики и информатики;
- ☐ практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач;
- ☐ навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами микроскопических и наносистем, обладающих как дискретным, так и непрерывным спектрами;
- ☐ основными математическими, теоретическими и экспериментальными физическими методами исследований на профессиональном уровне

**3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков**

1. Изобразить на проекции расположение элементов симметрии в следующих точечных группах:  $2/m$ ;  $mmm$ ;  $32$ ;  $422$ ;  $4/$ ;  $23$ ;  $m3$ ;  $m3m$ . Определить категорию этих точечных групп.

2. Какова симметрия бабочки, трехлопастного пропеллера, кирпича, гантели, рюмки?

3. Определить группу симметрии фигур, образующихся при сечении следующих многогранников:

многогранник Сечение проведено

тригональная пирамида через высоту и боковое ребро

тригональная пирамида через высоту параллельно стороне основания

тетрагональная дипирамида через высоту и боковое ребро

октаэдр через плоскость симметрии

4. Определить симметрию позиции атома в структуре  $\alpha$ -Fe. Какой станет эта симметрия при деформации структуры 1) вдоль оси 4, 2) вдоль оси 2, 3) вдоль оси 3.

5. Определить категорию точечных групп:  $D_2$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_{3v}$ ,  $S_4$ ,  $C_{4h}$ ,  $D_{6h}$ ,  $C_{6h}$ ,  $Th$ ,  $O$ ,  $I$ .

6). Определить точечную группу плоских молекул:

7) Определить точечную группу:

8). Записать символ точечной группы минимального порядка, включающей элементы симметрии: 1) две взаимно перпендикулярные оси 2; 2) оси 2, пересекающиеся под углом  $60^\circ$ ; 3) две взаимно перпендикулярные плоскости  $m$ ; 4) плоскости, пересекающиеся под углом  $45^\circ$ .

9. Доказать, что не может существовать а) элементарная ячейка, у которой центрированы две пары граней, б) базоцентрированная кубическая ячейка.

10. В гексагональной примитивной решетке выбрать ортогональный параллелепипед повторяемости минимального объема. Выразить его параметры через параметры элементарной ячейки.

11. В кристаллической структуре  $AB_2C_4$  атомы С образуют плотнейшую упаковку. Координационное число атомов А равно 4, а атомов В – 6. Каков тип занятых пустот? Какая часть пустот заполнена?

12. Записать символ точечной группы минимального порядка, включающей элементы симметрии: 1) две взаимно перпендикулярные оси 2, 2) оси 2, пересекающиеся под углом  $60^\circ$ , 3) оси 2, пересекающиеся под углом  $120^\circ$ , 4) две взаимно перпендикулярные плоскости  $m$ , 5) плоскости  $m$ , пересекающиеся под углом  $30^\circ$ , 6) три плоскости  $m$ .

13. Найти элементы симметрии, которые возникают при действии перпендикулярной трансляции на следующие оси:  $3$ ;  $4_3$ ;  $6$ ;  $6_3$ ;  $6_4$ .

14. Вещество состава АВ имеет кристаллическую структуру с симметрией  $Pnnm$ . Параметры элементарной ячейки:  $a=10.0 \text{ \AA}$ ,  $b=2.0 \text{ \AA}$ ,  $c=5.0 \text{ \AA}$ . Координаты атомов: А  $x=0$ ,  $y=1/2$ ,  $z=1/5$ ; В  $x=y=z=0$ . Изобразить расположение атомов в ячейке и рассчитать кратчайшее расстояние между атомами.

15. Элементарная ячейка кристалла имеет параметры:  $a=8.55 \text{ \AA}$ ,  $b=8.80 \text{ \AA}$ ,  $c=16.0 \text{ \AA}$ ,  $\beta=97.50^\circ$ .

Вычислить параметры обратной решетки для  $\lambda=1.54 \text{ \AA}$ .

16. Ячейка имеет форму куба. Атом А располагается в вершинах ячейки, атом В – в произвольной точке. Какова пространственная группа структуры, если атомы А и В 1) одинаковые, 2) разные?

17. Кратчайшее межатомное расстояние в одной из модификаций стронция равно  $4.18 \text{ \AA}$  (структурный тип  $\alpha$ -железа, объемноцентрированная структура). Определить плотность кристаллов.

18. Найти отношение плотности алмаза и графита, если параметр кубической ячейки алмаза  $3.56 \text{ \AA}$ , а параметры гексагональной решетки графита  $a=2.46 \text{ \AA}$ ,  $c=6.7 \text{ \AA}$ . Структурные типы алмаза и графита считать известными.

19. Кристаллы хлорида ртути имеют плотность 5.44 г/см<sup>3</sup>. Установить, является этот хлорид каломелью Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> или сулемой HgCl<sub>2</sub>, если параметры тетрагональной ячейки каломели a=4.47 Å, c=10.89 Å, Z=2, параметры орторомбической ячейки сулемы a=5.96 Å, b=12.74 Å, c=4.32 Å, Z=4.

20. Кристаллы CsNiCl<sub>3</sub> имеют следующую структуру: атомы Cl и Cs образуют совместную двойную шаровую упаковку, а атомы Ni находятся в октаэдрических пустотах. Определить, какая часть октаэдрических пустот заполнена.

2) Перечень контрольных вопросов для сдачи зачета

1. Симметрия, симметрические операции, точечные группы симметрии, сложение элементов симметрии, теоремы о сложении, классы симметрии.

2. Какую симметрическую операцию надо добавить к данной совокупности симметрических операций для того, чтобы получилась точечная группа симметрии?

a) m(x), m(Y), 2(Z); b) 1, 1, m(Z); c) 1, 1, 2(Z).

3. Проиндцировать отражения и определить размеры соответствующих элементарных ячеек (даны sin2θ на Co Kα –излучении): 0.0393; 0.0597; 0.0786; 0.1184; 0.1572.

4. Сингонии, элементарная ячейка и ее характеристики для каждой сингонии.

5. Определить тип решетки, примитивный параллелепипед которой имеет приведенные ниже характеристики (атомы располагаются только в вершинах этого параллелепипеда), изобразить проекцию элементарной ячейки.

вид основания  
параллелепипеда

Относительное расположение верхнего и нижнего  
оснований

ромб с α=60°  
основания

боковые ребра перпендикулярны плоскости

прямоугольник

произвольное расположение

(рассмотреть 2 случая: с перпендикулярными  
ребрами и не перпендикулярными ребрами).

6. . Натрий кристаллизуется в двух модификациях (Структурные типы Cu α-Fe). Параметр одной из них равен 4, 28 Å. Определить, какая это модификация и рассчитать ее плотность. (α-Fe. Атомы – в вершинах и в центре кубической ячейки.

Медь (Cu). Атомы – в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней.).

7. Первый этап рентгеноструктурного анализа. Определение размеров элементарной ячейки, плотности, индцирование.

8.а) В кубических кристаллах CsCl расстояние Cs – Cl равно 3.46 Å. Определить плотность кристаллов CsCl. Структура хлорида цезия: атомы Cl – в вершинах кубической ячейки, атомы цезия – в ее центре.

б) Определить плотность кубических кристаллов SrCl<sub>2</sub> (структурный тип флюорита, если расстояние Sr – Cl равно 3.02 Å. Структурный тип флюорита CaF<sub>2</sub>: атомы Ca – в вершинах кубической ячейки и в центрах всех граней, атомы фтора занимают центры всех восьми октантов.

9. Проиндцировать и найти размеры ячейки: 0.106, 0.318, 0.424, 0.742, 0.954. (даны sin2θ на Co Kα –излучении)

10. Типы плотнейших упаковок, привести примеры структур с плотнейшими упаковками атомов. Изображение структур координационными многогранниками.

10а. В кристаллической структуре состава AXBYC<sub>12</sub> атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку, атомы А занимают 3/8 тетраэдрических пустот, а атомы В – 2 /3 октаэдрических пустот. Найти X и Y.

10б. Кварц – гексагональная структура, a=4,913 Å, c=5,405 Å. На рентгенограмме зарегистрированы линии под следующими углами: 10,44; 13,34; 18,32; 19,78; 20,18; 21,28; 22,90; 25,15; 27,54; 27,76; 30,06; 32,12.

Найти индексы этих линий и рассчитать объем элементарной ячейки

11. Погасания и пространственные группы.

12. Элементарная ячейка дифенила ( $C_6H_5C_6H_5$ ) имеет параметры:

$a=8.24 \text{ \AA}$ ,  $b=5.73 \text{ \AA}$ ,  $c=9.51 \text{ \AA}$ ,  $\beta=94.50$ .

Найти число молекул в элементарной ячейке, если плотность равна  $1.16 \text{ г/см}^3$ . Известно, что имеются систематические погасания  $h0l$  с нечетными  $h$  и  $0k0$  с нечетными  $k$ .

Определить пространственную группу кристалла. Какие заключения можно сделать о симметрии молекулы и о ее расположении в элементарной ячейке?

13.Общая схема второго этапа рентгеноструктурного анализа

14.Дифракция рентгеновских лучей в кристалле и способы получения дифракционной картины.

15.Понятие обратной решетки.

#### 4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей. Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.