

**Правительство Российской Федерации**  
**Санкт-Петербургский государственный университет**  
*Геологический факультет*

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
**УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Рентгеновские методы изучения дефектов в кристаллах**  
**X-ray diffraction methods for characterization of crystal defects**

Язык(и) обучения русский

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Трудоёмкость 1 зачётных единиц

Регистрационный номер  
рабочей программы:

<small>код года утверждения</small>	/	<small>код факультета или иного структурного подразделения</small>	/	<small>порядковый номер или шифр</small>
-----------------------------------------	---	------------------------------------------------------------------------	---	----------------------------------------------

Санкт-Петербург  
2012

## Раздел 1. Характеристики, структура и содержание учебных занятий

### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

Дисциплина «Рентгеновские методы изучения дефектов в кристаллах» изучается в третьем семестре и является курсом по выбору. Цель учебной дисциплины - ознакомление студентов с основами кристаллохимии дефектных кристаллов и рентген-дифракционными методами изучения реального строения кристаллических материалов.

Задачи дисциплины:

Теоретическая и практическая подготовка студентов по вопросам кристаллохимии реального строения кристаллов, классификации дефектов, применения рентген-дифракционных методов для изучения различных типов дефектов и математического аппарата для интерпретации экспериментальных данных.

### 1.2. Требования к подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)

Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь подготовку по базовым программам кристаллографии, кристаллохимии, рентгенофазового анализа, физики, химии.

### 1.3. Перечень формируемых компетенций (результаты обучения)

Углубленное понимание основ кристаллохимии дефектных кристаллов и методов рентген-дифракционного изучения реальной структуры кристаллических материалов природного и синтетического происхождения. Способность использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности.

### 1.4. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимся

Способность ориентироваться в многообразии проявлений реального (дефектного) строения кристаллов. Понимание закономерностей образования различных типов дефектов и их влияния на свойства кристаллов. Умение правильно выбрать подходящие методики рентген-дифракционного исследования. Навыки самостоятельной работы с рентгеновскими дифрактометрами и специализированным программным обеспечением.

### 1.5. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Лекции - 10 часов, практические занятия - 20 часов.

### 1.6. Организация учебных занятий

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Аудиторная учебная работа обучающихся								Самостоятельная работа						Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	в т.ч. с использованием методических	текущий контроль	промежуточная аттестация		
<i>по формам обучения</i>																
	10			20					2	39		15		25	20	1
<b>ИТОГО:</b>	10			20					2	39		15		25	20	1

Виды, формы и сроки  
текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Промежуточная аттестация		Текущий контроль	
	Виды	Сроки	Формы	Сроки
<i>очная форма обучения</i>				
Модули не предусмотрены	зачет	с 10 декабря	результаты решения практических задач	систематически в течение курса

### 1.7. Структура и содержание учебных занятий

Лекций -10 час., практических занятий - 20 час.

Тема 1. Классификация дефектов в кристаллах по их размерности и по условиям образования. Влияние дефектов на физические и химические свойства кристаллов. Различные способы обнаружения и количественной характеристики дефектной субструктуры кристаллов. Сравнительный анализ методов электронной микроскопии, рентгеновской топографии, анализа профилей дифракционных отражений при исследовании реального строения кристаллических материалов. Области применения. Преимущества и ограничения. Лекция 2 час.

Тема 2. Влияние инструментальных факторов на дифракционный профиль. Разделение физических и инструментальных компонент профиля. Свертка. Фурье-трансформанта. Теорема о свертке. Количественные характеристики профилей пиков; математические функции, применяемые для их описания. Лекция 1 час.

Тема 3. Идеальные и идеально-мозаичные кристаллы. Понятие области когерентного рассеяния (ОКР). Применимость кинематической и динамической теорий. Определение среднего размера ОКР. Уравнение Шеррера. Микронапряжения в кристаллах и их связь с другими типами дефектов. Способы разделения влияния размеров ОКР и микронапряжений на профили дифракционных рефлексов. Метод Вильямсона-Холла. Метод моментов (дисперсии). Метод Уоррена-Авербаха. Лекция 2 часа, практические занятия 6 часов.

Тема 4. Двойники и дефекты упаковки в металлах. Теория Уоррена. Определение функции размерного распределения ОКР. Моделирование дифракционной картины при помощи интерференционной функции. Лекция 1 час, практические занятия 6 часов.

Тема 5. Основные типы кристаллических твердых растворов с атомарными дефектами различной протяженности. Связь между размерностью атомарного дефекта и типом беспорядка. Внутренняя упорядоченность. Симметрия. Способы описания. Лекция 1 час.

Тема 6. Твердые растворы с точечными атомарными дефектами. Дифракционная картина. Методы определения распределения примесных атомов и вакансий по кристаллографическим позициям. Возможности использования параметров кристаллической решетки и межатомных расстояний. Определение смешанных заселенностей кристаллографических позиций при рентгеноструктурных исследованиях монокристаллов: требования к эксперименту, использование МНК и Фурье-синтезов. Лекция 1 час, практические занятия 4 часа.

Тема 7. Твердые растворы с двумерными и одномерными атомарными дефектами. Дифракционная картина. Вероятно-статистические модели. Моделирование нерегулярных смешанослойных структур. Классификация. Диагностика по дифракционной картине. Выражения для структурного фактора. Особенности эксперимента. Лекция 1 час, практические занятия 4 часа.

Тема 8. Твердые растворы с трехмерными атомарными дефектами. Дифракционная картина. Способы описания. Понятие о композитных структурах и их классификация. Математические основы описания модуляций в кристалле. Представления о сверхпространствах. Выражения для структурного фактора. Сверхпространственные группы симметрии и их символы. Выражения для структурного фактора. Представления в сверхпространстве. Расчет межатомных расстояний. Использование синтезов Фурье и прямых методов при расшифровке. Лекция 1 час.



## Раздел 2. Обеспечение учебных занятий

### 2.1. Методическое обеспечение

#### 2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы:

Мультимедиа проектор

#### 2.1.2. Методическое обеспечение самостоятельной работы

Компьютеры

#### 2.1.3. Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Результаты выполнения практических работ. Положительным результатом считается получение количественных характеристик, согласующихся с контрольными в пределах заданной погрешности.

#### 2.1.4. Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы)

##### 2.1.4.1. Перечень контрольных задач:

Определение размеров ОКР и микронапряжений в порошковом образце

Определение функции размерного распределения ОКР путем моделирования дифракционного профиля

Определение смешанных заселенностей кристаллографических позиций при рентгеноструктурном исследовании монокристалла

Моделирование дифракционной картины нерегулярной смешанослойной структуры

### 2.2. Кадровое обеспечение

#### 2.2.1. Требования к образованию и (или) квалификации штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к преподаванию дисциплины

Преподаватели с высшим специальным образованием (специальность - кристаллография)

#### 2.2.2. Требования к обеспеченности учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Не требуется

#### 2.2.3. Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

Не предусмотрены

### 2.3. Материально-техническое обеспечение

#### 2.3.1. Требования к аудиториям (помещениям, местам) для проведения занятий

Стандартная аудитория, оснащенная демонстрационным проектором

#### 2.3.2. Требования к аудиторному оборудованию, в том числе к неспециализированному компьютерному оборудованию и программному обеспечению общего пользования

Мультимедиа проектор, персональный компьютер с ПО PowerPoint, 5-6 рабочих компьютеров, принтер

#### 2.3.3. Требования к специализированному оборудованию

## Рентгеновский порошковый дифрактометр

2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению  
ПО, комплектующее дифрактометр, Origin, MathCad

2.3.5. Требования к перечню и объёму расходных материалов  
0,2 пачки бумаги формата А4 для печати отчетов по практическим занятиям

## 2.4. Информационное обеспечение

### 2.4.1. Список обязательной литературы

1. Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. - СПб.: Наука, 2002.

2. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электроннооптический анализ. - М., 1970, 370 с.

3. Гинье А. Рентгенография кристаллов. - М.: Гос. изд. физ.-мат. лит. - 1961. -604 с.

4. Франк-Каменецкая О.В., Рождественская И.В. Атомарные дефекты и кристаллы

5. Органова Н.И. Кристаллохимия несоизмерных и модулированных смешаносл

6. Ковба В. Рентгенография в неорганической химии. МГУ, 1991

7. Уманский Я.С. Рентгенография металлов. М., 1967

### 2.4.2. Список дополнительной литературы

1. Warren, В.Е., X-ray Diffraction (New York: Dover Publications), 1990

2. Drits V.A., Tchoubar C. X-Ray Diffraction by Disordered Lamellar Structures. – Ber

3. Coppens P. Incommensurate and Composite structures. Lecture Notes. 1992-1995.

### 2.4.3. Перечень иных информационных источников

Не требуется

### Раздел 3. Процедура разработки и утверждения рабочей программы

#### Разработчик(и) рабочей программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Касаткин Игорь Алексеевич	канд.геол. мин.наук	нет	доцент	<a href="mailto:igor.kasatkin@gmail.com">igor.kasatkin@gmail.com</a>

В соответствии с порядком организации внутренней и внешней экспертизы образовательных программ проведена двухуровневая экспертиза:

первый уровень (оценка качества содержания рабочей программы и применяемых педагогических технологий)		
Наименование кафедры	Дата заседания	№ протокола
кристаллографии	10.05.2012	№5
минералогии	04.05.2012	№6
второй уровень (соответствие целям подготовки и учебному плану образовательной программы)		
Экспертиза второго уровня выполнена в порядке, установленном приказом		
<i>должностное лицо</i>	<i>дата приказа</i>	<i>№ приказа</i>
Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

#### Иные документы об оценке качества рабочей программы

Документ об оценке качества	Дата документа	№ документа

#### Утверждение рабочей программы

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

#### Внесение изменений в рабочую программу

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа