

КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

"УТВЕРЖДАЮ"

Проректор _____ В.С.Бухмин

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Кристаллография и рентгеноструктурный анализ

Цикл ДС

ГСЭ - общие гуманитарные и социально-экономические дисциплины; ЕН - общие математические и естественнонаучные дисциплины; ОПД - общепрофессиональные дисциплины; ДС - дисциплины специализации; ФТД - факультативы.

Направление: 010400 — Физика
(Номер направления) (Название направления)

Принята на заседании кафедры физики твёрдого тела
(Название кафедры)

(протокол № 7 от "17" сентября 2009 г.)

Заведующий кафедрой
_____ (Л.Р. Тагиров)

Утверждена Учебно-методической комиссией физического факультета
(Название факультета)

КГУ

(протокол № от " " _____ 200 г.)

Председатель комиссии
_____ (Д.А. Таюрский)

Методические указания (пояснительная записка)

Рабочая программа дисциплины

"Кристаллография и рентгеноструктурный анализ"

Предназначена для студентов 3 курса,

по направлению: 010400 – Физика
(Номер направления) (Название направления)

АВТОР: А.С. Храмов

КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ:

Данный курс лекций состоит из двух взаимосвязанных блоков. В первой части курса излагаются теоретические основы анализа кристаллической структуры на базе теории групп симметрии и модели плотнейших упаковок. Вторая часть курса посвящена экспериментальным исследованиям структуры кристаллов методом рентгеноструктурного анализа, а именно: методы получения дифрактограмм и их обработка. Кроме того, дается представление о некоторых прикладных применениях рентгеноструктурного анализа при изучении поликристаллов.

1. Требования к уровню подготовки студента, завершившего изучение дисциплины "Кристаллография и рентгеноструктурный анализ"
(Наименование дисциплины)

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины должны:

- обладать теоретическими знаниями об элементах симметрии, операциях симметрии, группах симметрии, о механизмах формирования рентгеновского излучения;
- понимать физические процессы, происходящие при дифракции рентгеновского излучения в кристаллах;
- овладеть практическими методами определения (индицирования) параметров кристаллической решетки;
- приобрести навыки решения задач по построению правильной системы точек пространственных групп симметрии.

2. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах)

Форма обучения очная
очная, заочная, вечерняя

Количество семестров 2

Форма контроля: 5 семестр экзамен
зачет, экзамен

№	Виды учебных занятий	Количество часов	
		5 семестр	6 семестр
1	Всего часов по дисциплине	134	24
2.	Самостоятельная работа	8	7
3.	Аудиторных занятий	126	17
	в том числе: лекций	54	
	семинарских (или лабораторно-практических) занятия	72	17

Содержание дисциплины

ТРЕБОВАНИЯ ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО СТАНДАРТА К ОБЯЗАТЕЛЬНОМУ МИНИМУМУ СОДЕРЖАНИЯ ПРОГРАММЫ

Индекс	Наименование дисциплины и ее основные раз- делы	Всего часов
ДС	-	

Примечание: если дисциплина устанавливается вузом самостоятельно, то в данной таблице ставится прочерк.

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов	
		лекции	семинарские (лаб.-практ.) занятия
1	<u>Понятие о кристалле.</u> Эмпирические законы кристаллографии. Кристаллическая решетка.	2	
2	<u>Кристаллографические индексы узлов, рядов, плоскостей.</u> Виды элементарных ячеек. Фундаментальный метрический тензор. Обратная решетка. Соответствие между прямой и обратной решетками. Геометрические соотношения в кристаллической решетке. Кристаллографические сингонии.	6	
3	Понятие о симметрии. Элементы симметрии описывающие вращение и	4	

	отражение.		
№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов	
		лекции	семинарские (лаб.-практ.) занятия
4	<u>Введение в теорию групп.</u> Линейные операторы. Ортогональные преобразования. Матрица вращения. Свойства операций симметрии. Определения и примеры групп. Представления групп.	4	
5	<u>Точечные группы симметрии.</u> Сложение элементов симметрии. Построение точечных групп симметрии. Аксиальные группы симметрии. Группы симметрии с несколькими главными осями симметрии. Распределение точечных групп симметрии по кристаллографическим сингониям.	6	
6	<u>Пространственные группы симметрии.</u> Элементы симметрии, включающие трансляцию. Решетки Бравэ. Принципы образования пространственных групп симметрии. Построение правильных систем точек.	4	16
7	Элементы теории плотнейших упаковок.	2	
8	Рентгеновское излучение. Природа рентгеновских лучей. Сплошной и характеристический спектры рентгеновского излучения. Поглощение рентгеновских лучей.	4	
9	Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Кристалл как дифракционная решетка. Условие Лауэ. Условие Вульфа-Брэгга.	2	

№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов	
		лекции	семинарские (лаб.-практ.) занятия
10	<u>Методы получения рентгеновской дифракции.</u> Метод Лауэ. Метод вращения-качания. Метод порошка. Дифракционные классы симметрии.	4	8
11	<u>Регистрация дифрагированного рентгеновского излучения.</u> Фотографический метод регистрации. Ионизационный метод регистрации. Устройство и принципы работы дифрактометров. Погрешности в определении межплоскостных расстояний.	4	8
12	<u>Индицирование порошковых дифрактограмм.</u> Индицирование дифрактограмм поликристаллов кубической сингонии. Индицирование дифрактограмм поликристаллов тетрагональной, гексагональной и ромбоэдрической сингоний. Индицирование дифрактограмм поликристаллов ромбической сингонии. Индицирование дифрактограмм поликристаллов моноклинной и триклинной сингоний.	4	16
13	<u>Методы прецизионного определения периодов решетки.</u> Графические методы прецизионного определения параметров элементарной ячейки. Аналитические методы прецизионного определения параметров элементарной ячейки	4	8

№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов	
		лекции	семинарские (лаб.-практ.) занятия
14	<u>Рентгенофазовый анализ.</u> Методы качественного фазового анализа. Методы количественного фазового анализа.	4	16
15	<u>Решение задач</u>		17
	Итого часов:	54	89

Примечание: программа содержит подробную характеристику содержания темы. Название, количество тем в программе, количество часов на каждую тему определяется согласно Государственному образовательному стандарту по специальности.

ПЕРЕЧЕНЬ РАБОТ ЛАБОРАТОРНОГО СПЕЦПРАКТИКУМА

1. Расчет правильной системы точек для различных пространственных групп симметрии.
2. Изучение аппаратуры для рентгеноструктурного анализа.
3. Приготовление образцов поликристаллов для рентгеноструктурных исследований.
4. Получение, расчет и индицирование дифрактограмм поликристаллов кубической сингонии.
5. Прецизионное определение параметров элементарной ячейки.
6. Качественный фазовый анализ.
7. Количественный фазовый анализ.
8. Определение блоков мозаики и микронапряжений.

ТЕМАТИКА ЗАДАЧ

1. Построение правильных систем точек в случае ромбоэдрической, гексагональной и кубической сингоний.
2. Индицирование дифрактограмм поликристаллов тетрагональной, гексагональной, ромбоэдрической и ромбических сингоний.

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. М., 1981г., 240 с.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., 1983 г., 360 с.
3. Бокий Г.Б., Порай-Кошиц М.М. Рентгеноструктурный анализ. Том 1. М., 1956 г., 420 с.
4. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. М., 1972 г., 320 с.
5. Русаков А. Рентгенография металлов. М., 1977 г., 480 с.
6. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Основы кристаллографии. М., Физматлит, 2004 г., 500 с.
7. Храмов А.С., Назипов Р.А. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Ч.1. Казань, 2009 г., 64 с.
8. Храмов А.С., Назипов Р.А. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Ч.V. Краткий терминологический словарь. Казань, 2009 г., 78 с.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Бокий Г.Б. Введение в кристаллохимию. М., 1952 г., 320 с.
2. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М., 1968 г., 400 с.
3. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. М., 1978 г., 420 с.
4. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. М., 1961 г., 668 с.
5. Задачи по кристаллографии. Под ред. Чупрунова Е.В., Хохлова А.Ф. М., Физматлит, 2003 г., 208 с.

Приложение
к программе дисциплины
“Кристаллография и рентгеноструктурный анализ”

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Элементы симметрии, включающие поворот и отражение.
2. Рентгеновские лучи. Характеристический спектр рентгеновского излучения.
3. Построить правильную систему точек группы симметрии $I4cm$.
4. Обратная решетка, связь с прямой решеткой.
5. Индексирование дифрактограмм поликристаллов гексагональной, тетрагональной и ромбоэдрической сингоний.
6. Построить правильную систему точек группы симметрии $P422$.
7. Эмпирические законы кристаллографии и их объяснение.
8. Условие Вульфа-Брэгга, условие Лауэ.
9. Построить правильную систему точек группы симметрии $P4/m$.
10. Точечные группы симметрии. Вывод.
11. Метод Лауэ. Дифракционные классы симметрии.
12. Построить правильную систему точек группы симметрии $I4/mmm$.
13. Углы между плоскостями, между плоскостью и прямой; межплоскостное расстояние.
14. Метод порошка (Дебая-Шерера).
15. Построить правильную систему точек группы симметрии $I42m$.
16. Образование пространственных групп симметрии, выбор начала координат.
17. Метод вращения-качания.
18. Построить правильную систему точек группы симметрии $Pnna$.
19. Действие двух плоскостей, расположенных под углом друг к другу.
20. Графические методы прецизионного определения периодов решетки.
21. Построить правильную систему точек группы симметрии $Immm$.
22. Ортогональные преобразования, матрица вращения.

23. Аналитические методы прецизионного определения параметров решетки.
24. Построить правильную систему точек группы симметрии $Pnma$.
25. Кристаллографические индексы узлов, рядов и плоскостей.
26. Спектр поглощения рентгеновского излучения.
27. Построить правильную систему точек группы симметрии $Cmcm$.
28. Матричное представление элементов симметрии включающих трансляцию.
29. Количественный фазовый анализ (метод гомологических пар, метод внешнего стандарта).
30. Построить правильную систему точек группы симметрии $P4/mcs$.