

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«25» сентября 2025г.

ОЦЕНОЧНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ (ФОС)

для оценивания результатов обучения
по дисциплине (модулю):

Вар Рентгеноструктурный анализ

Направление подготовки/ специальность:

05.03.01 Геология

Профиль программы бакалавриата:

Геохимия

Форма обучения:

Очная

Москва 2025

Фонд оценочных средств по дисциплине «**Рентгеноструктурный анализ**» разработан на основе ОС по специальности/направлению подготовки 05.03.01 Геология, утвержденного приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции)

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

1. Требования к результатам освоения дисциплины

№ п/п	Код компе тенции	Содержание компетенци и (или ее части)	Индикаторы достижения компетенций	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций		
				Знать	Уметь	Владеть
1	Б.ОПК-1.	Способен применять знания фундаментальных разделов наук о Земле, базовые знания естественно-научного и математического циклов при решении стандартных профессиональных задач.	Б.ОПК-1. И-1. Использует базовые знания фундаментальных разделов математических и естественных наук в профессиональной деятельности Б.ОПК-1. И-2. Использует базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле в профессиональной деятельности	теоретические основы и практически при использовании монокристаллических и порошковых рентгенодифракционных методов	использовать экспериментальные данные для определения состава и структуры кристаллов, а также владеть навыками интерпретации полученных результатов на основе современных кристаллохимических концепций.	
2	Б.ПК-2.	Способен в составе научно-исследовательского коллектива участвовать в получении и интерпретации информации (в соответствии	Б.ПК-2. И-1. Под руководством специалиста высокой квалификации участвует в получении информации по объектам исследования (в соответствии с профилем	основные положения метода проб и ошибок, тяжелого атома и подходов, основанных на соотношениях между экспериментальными величинами		

		и с профилем подготовки).	подготовки), составляет рефераты и аналитические обзоры по собранной информации. Б.ПК-2. И-2. Владеет навыками по обработке полученных результатов согласно требованиям, принятым в профессиональном сообществе. Б.ПК-2. И-3. Готовит отчетную документацию по выполненной работе.	структурных амплитуд, для выявления основных элементов кристаллических структур		
	Б.ПК-5	Готов к работе на современных полевых/лабораторных приборах, установках и оборудовании в соответствии с профилем подготовки.	Б.ПК-5. И-1. Знает физические принципы и технические характеристики стандартного современного полевого/лабораторного оборудования (по профилю подготовки). Б.ПК-5. И-2. Имеет базовые навыки работы под руководством	принципы получения экспериментальных рентгенодифракционных данных в монокристаллических дифрактометрах и их последующей обработки. Основные этапы определения и уточнения кристаллических структур		

			специалиста высокой квалификации на полевом/лабораторном оборудовании (по профилю подготовки). Б.ПК-5. И-3. Знает правила техники безопасности при работе на полевом/лабораторном оборудовании (по профилю подготовки).	применением современных вычислительных комплексов		
	Б.ПК-12.	Способен организовывать мероприятия, направленные на соблюдение правил по охране труда и контроль за соблюдением правил техники безопасности.	Б.ПК-12. И-1. Знает правила по охране труда и контролю за соблюдением техники безопасности при поведении полевых/лабораторных работ. Б.ПК-12. И-2. Имеет базовые навыки организации мероприятий по соблюдению правил по охране труда и контролю за соблюдением правил	основы правильной эксплуатации и автоматических монокристаллических дифрактометров	по данным электронно-зондового анализа рассчитывать химический состав минерала и использовать необходимые опции для определения кристаллических структур	информации по теме исследований, опытом ее обобщения и методами графического представления кристаллических структур

			техники безопасности.			
	Б.СПК-1.	Способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации в области наук геохимического цикла (формируется частично).	Б.СПК-1. И-1. Владеет методами поиска и анализа информации в области наук геохимического цикла, в том числе – с применением современных информационных коммуникационных технологий. Б.СПК-1. И-2. Владеет навыками систематизации и интерпретации данных в области наук геохимического цикла.	основные принципы работы с монокристалльными рентгенографическими данными.	на основе результатов монокристалльной рентгеновской съемки идентифицировать соединения, , получать и интерпретировать детальные структурные данные на основе уточнения структуры по монокристалльным экспериментальным данным	теоретическими основами и практически навыками по использованию монокристалльных рентгенодифракционных методов при исследовании состава и структуры кристаллов.

Оценочные средства для самостоятельной работы, текущего и промежуточного контроля

8 семестр, третья часть курса “Рентгеноструктурный анализ”

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине применяется для всех типов контроля

2.1 Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля:

Рентген при высоких давлениях (аппаратура, результаты)

Рентген при высоких температурах (порошки, монокристаллы, результаты)

Нейтроннография в структурном анализе

Электронография в структурном анализе

2.2 Расчетные домашние задания:

Локализация атомов на основе функции Патерсона

Этапы уточнения структуры

Диффузное рассеяние и его роль в изучении структурных дефектов

Определение знаков структурных амплитуд с использованием неравенств Харкера – Каспера

Статистический подход к определению знаков структурных амплитуд

Плотность галита 2.168 г/см^3 . Рассчитайте параметр элементарной ячейки галита NaCl.

Параметр кубической элементарной ячейки CaF_2 $a = 5.463 \text{ \AA}$. Кристалл установлен в дифрактометре таким образом, что ось с $[001]$ параллельна оси вращения и перпендикулярна плоскости, в которой лежат первичный (распространяется вдоль $[-1\ 0\ 0]$) и дифрагированные лучи. На какой угол следует повернуть кристалл, чтобы получить отражение 460 при съёмке на Cu K излучении ($1.5418 \text{ \AA}$)? Какой угол составит дифрагированный луч по отношению к первичному? Какой угол составят первичный и дифрагированный лучи по отношению к осям ячейки?

Кубический кристалл с параметром ячейки $a = 4.026 \text{ \AA}$ установлен в монокристалльном дифрактометре так, что направление распространения первичного пучка соответствует $[-100]$. Съёмка проводится на медном излучении ($\lambda_{\text{Cu}} = 1.5418 \text{ \AA}$). Рассчитайте, насколько надо повернуть кристалл вокруг оси ω , чтобы зарегистрировать рефлекс с индексом 240. Какой угол составит дифрагированный луч по отношению к первичному? Какой угол составят первичный и дифрагированный лучи по отношению к осям ячейки?

Параметры эл.яч. монтichelлита CaMgSiO_4 : $a=4.82$, $b=11.08$, $c=6.37 \text{ \AA}$. X-луч (Cu K α излучение, $\lambda=1.5418 \text{ \AA}$) распространяется вдоль $[-100]$. На какой угол надо повернуть кристалл, чтобы зарегистрировать рефлекс 230. Определите углы между первичным и дифрагированным лучами с осями элементарной ячейки.

Выведите уравнение расчета параметра элементарной ячейки на основе рентгенограммы, полученной в камере РКОП или РГНС.

Для тригонального кристалла родохрозита MnCO_3 с использованием Cu K α излучения ($1.5418 \text{ \AA}$) вдоль взаимно перпендикулярных осей получены рентгенограммы вращения, а также лауэграммы, когда каждая из этих осей была параллельна первичному пучку. Радиус кассеты 30 мм, данные снимков указаны ниже.

ось	I	II	III
слоевая линия	8-ая	4-ая	2-ая
расстояние до 0-й сл. линии (мм)	38.40	35.55	25.40
симметрия Лауэ снимков	3m	m	2

Определить параметры элементарной ячейки и Лауэ класс родохрозита.

В камере качания с использованием Cu K излучения ($1.5418 \text{ \AA}$) для кубического кристалла получены три рентгенограммы, когда направления $[100]$, $[110]$ и $[111]$ были параллельны оси качания. Радиус кассеты 30 мм. Ниже приведены результаты замеров расстояний $2H_n$ между +n-ой и -n-ой слоевыми линиями:

n	3	5	3
2H _n (мм)	41.0	53.5	51.5

Определить параметры и тип элементарной ячейки.

В кристалле, не обладающим пьезоэффектом (есть -1), установлены погасания $0kl$ $k+l=2n+1$ и $hk0$ $h=2n+1$. Электронно-зондовый анализ выявил в его составе присутствие Pb и P. На функции Патерсона выявлены наиболее высокие максимумы со следующими координатами: 1) 0 0.1 0; 2) 0.4 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$; 3) $\frac{1}{2}$ 0 0.2. Какова симметрия функции Патерсона? Какую информацию можно получить о положении атомов Pb в структуре?

Дравертит $\text{CuMg}(\text{SO}_4)_2$, обладает моноклинной симметрией, $a = 4.81$, $b = 8.44$, $c = 6.77$ Å, $\beta 94.6^\circ$. Закономерные погасания: $0k0$ $k=2n+1$, $h0l$ $h+l=2n+1$. N(z) тест указал на наличие ц. инв. Плотность 3.5 г/см³. Определите пр. группу и число формульных единиц. Самые высокие максимумы на функции Патерсона: 0 0 0, 0 0 $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0, 0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$. Выскажите предположения о расположении атомов Cu и Mg.

Дифракционная картина кристалла выявила присутствие отражений: $0kl$ с $k=2n$; $h0l$ с $l=2n$ и $hk0$ с $h=2n$. Изобразите пр. гр. Функция Патерсона содержит максимумы $u=0.3$, $v=1/2$, $w=0$; $u=0$, $v=0.1$, $w=1/2$; $u=1/2$, $v=0$, $w=0.4$. Определите координаты «тяжелого» атома.

Ниже приведены наиболее значимые значения нормированных структурных амплитуд E, полученные от centrosymmetrichного кристалла. Три из них с произвольно выбранными знаками использованы для фиксации начала координат. Пользуясь знаковым соотношением из тройных произведений, сделайте все возможные заключения о знаках E остальных рефлексов.

hkl	428	2-32	3 -1 6	1 3 2	4 1 3	2 4 1
E	2.4	2.6	3.1	2.5	2.0	2.6
s	+	+	+			

Рассчитайте валентные усилия в Ti-октаэдре в структуре кальцитита. Расстояния Ti-O равны 1.897x2, 1.959x2, 1.989x2 Å.

Тетрагональный кристалл халькопирита CuFeS_2 с параметрами ячейки $a=b=5.286$ и $c=10.41$ Å установлен в дифрактометре так, что первичный пучок идет вдоль $[00-1]$, а плоскость (204) перпендикулярна плоскости дифракции. Какой нужен поворот, чтобы вывести ее в отражающее положение. Определите углы первичного и дифрагированного лучей с осями a и c элементарной ячейки. Плотность минерала 4.2 г/см³. Определите число формульных единиц.

Пр.гр. I-42d: какие позиции возможны для атомов Cu, Fe и S?

У ромбического кристалла, обладающего пьезоэффектом и содержащего Zr, Si и O, дифракционная картина содержит погасания: $0kl$: $l=2n+1$. Функция Патерсона содержит максимумы 0.2 0 $\frac{1}{2}$; 0 0.3 0; 0.205 0.296 $\frac{1}{2}$. Какие первые шаги по определению структуры Вы предпримете?

3. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

Вывод уравнения расчета параметра элементарной ячейки на основе рентгенограммы, полученной в камере РКОП или РГНС.

Проблема выявления центра инверсии. Закон Фриделя. Неэквивалентность Фриделевских пар в случае аномального рассеяния. Статистика интенсивностей.

Принципы получения и обработки экспериментального материала в дифрактометрах «Синтекс» и «X-Calibur».

Пределы по hkl при съемке кристаллов.

Аномальное рассеяние и его роль в структурном анализе.

Метод проб и ошибок. Первые определения структур квасцов и халькантита,

Функция Патерсона и её свойства. Формула расчета.

Функция электронной плотности. Ошибки, связанные с обрывом рядов Фурье. Почему при суммировании комплексных F_{hkl} получается вещественное распределение (xyz)?

Единичные структурные амплитуды при регистрации дифракционной картины алмаза. На примере этой структуры объясните, почему знаки структурных амплитуд фиксируют начало координат. Определение знаков структурных амплитуд на основе неравенств Харкера-Каспера (на примере алмаза).

Детерминант Карле-Хауптмана. Вывод неравенств Харкера-Каспера на его основе.

Равенство Сэйра.

Этапы уточнения структуры. Температурный фактор. Поправка на поглощение.

Расчет локального баланса валентных усилий.

Параметр Флака при определении энантиоморфных форм

Использование метода Ритвельда в структурном анализе.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: освоение теоретических основ и практических приемов по использованию монокристалльных и порошковых рентгенодифракционных методов при исследовании состава и структуры кристаллов, а также интерпретация полученных результатов на	Знания отсутствуют или весьма фрагментарны	Знания есть, но отсутствует их систематичность	Знания систематические, но имеются пробелы	Систематические знания в достаточном объеме

основе современных кристаллохимических концепций.				
Умения: Получить набор дифракционных отражений, определить координаты атомов, их тепловые поправки, межатомные расстояния и углы	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности непринципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы в понимании принципов структурного определения	Успешное умение расчета углов для вывода определенных атомных плоскостей в отражающее положение и понимание подходов к определению структур
Владения: методами получения экспериментальных данных и расчетов на их основе для структурных определений	Отсутствует понимание подходов к решению задач рентгено-структурного анализа	Фрагментарное владение методикой, наличие отдельных навыков	В целом сформированные навыки структурных определений, но допускаются ошибки в понимании их отдельных этапов	Владение методами определения атомных позиций в кристаллических структурах и их последующим уточнением

Автор программы академик Пуцаровский Д.Ю.