

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОГЛАСОВАНО**

**Заведующий кафедрой**

**Кафедра композиционных  
материалов и физико-химии  
металлургических процессов  
(КМФХМЦ ТФ)**

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий ОП ВО

**УТВЕРЖДАЮ**

**Заведующий кафедрой**

**Кафедра композиционных  
материалов и физико-химии  
металлургических процессов  
(КМФХМЦ ТФ)**

наименование кафедры

**Шиманский А.Ф.**

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ,  
РЕНТГЕНОГРАФИЯ И  
ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ**

Дисциплина Б1.В.04 Кристаллография, рентгенография и электронная  
микроскопия

Направление подготовки / 22.03.01 Материаловедение и технологии  
специальность материалов профиль подготовки

Направленность 02 03 01 00 02 Физико-химия материалов и  
(профиль) \_\_\_\_\_

Форма обучения очная

Год набора 2020

Красноярск 2021

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по укрупненной группе

220000 «ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ»

---

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

Направление 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов

---

профиль подготовки 22.03.01.00.02 Физико-химия материалов и процессов

---

Программу  
составили

Д-р.физ.-мат. наук, Профессор, Якимов И.С.

---

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Кристаллография является одним из базовых разделов наук о материалах, а рентгенография и электронная микроскопия – важнейшими экспериментальными методами исследования и диагностики, имеющими большое практическое значение в материаловедении и многих др. отраслях науки и техники. Предметом дисциплины является кристаллическое строение вещества и дифракционные и электронно-микроскопические методы его исследования.

Целью изучения дисциплины является:

овладение подходами и теоретическими основами геометрической и структурной кристаллографии, экспериментальными методами рентгеновского дифракционного анализа и электронной микроскопии.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачей изучения дисциплины является формирование компетенций и навыков, позволяющих проводить исследования фазового состава, кристаллического строения и атомной структуры твердофазных веществ и материалов методами рентгенографии и электронной микроскопии.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

<b>ПК-5:готовностью выполнять комплексные исследования и испытания при изучении материалов и изделий, включая стандартные и сертификационные, процессов их производства, обработки и модификации</b>	
Уровень 1	Знать основные закономерности строения и симметрии кристаллов
Уровень 2	Знать физическую природу и основные свойства рентгеновских и электронных лучей
Уровень 3	Знать основы кинематической теории дифракции
Уровень 1	Уметь оперировать с терминологией, точно выражать научным языком постановку исследовательской аналитической задачи и результаты дифракционного и электронно-микроскопического анализа
Уровень 1	Владеть способами поиска информации в базах кристаллографических и структурных данных и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в области применения дифракционных методов
<b>ПК-6:способностью использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано-структуры на свойства материалов, их взаимодействии</b>	

<b>с окружающей средой, полями, частицами и излучениями</b>	
Уровень 1	Знать основные методы рентгенографии, рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии
Уровень 1	Уметь обрабатывать полнопрофильные дифракционные спектры, измеренные на установках рентгеноструктурного анализа
Уровень 2	Уметь использовать основные рентгеновские методы дифракционного анализа для экспериментального изучения атомно-кристаллической структуры, фазового и элементного состава веществ и многофазных поликристаллических материалов
Уровень 1	Владеть методикой подготовки проб для анализа различными дифракционными и электронно-микроскопическими методами
Уровень 2	Владеть навыками исследования веществ и многофазных поликристаллических материалов с применением современных компьютерных программ методов дифракционного и электронно-микроскопического анализа

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.ОД.4 Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия относится к циклу обязательных дисциплин вариативной части учебного плана.

1.5 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр	
		6	7
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>8 (288)</b>	<b>4 (144)</b>	<b>4 (144)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>3 (108)</b>	<b>1,5 (54)</b>	<b>1,5 (54)</b>
занятия лекционного типа	1 (36)	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа			
в том числе: семинары			
практические занятия	1 (36)	0,5 (18)	0,5 (18)
практикумы			
лабораторные работы	1 (36)	0,5 (18)	0,5 (18)
другие виды контактной работы			
в том числе: групповые консультации			
индивидуальные консультации			
иная внеаудиторная контактная работа:			
групповые занятия			
индивидуальные занятия			
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>3 (108)</b>	<b>1,5 (54)</b>	<b>1,5 (54)</b>
изучение теоретического курса (ТО)			
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)			
реферат, эссе (Р)			
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Экзамен)</b>	<b>2 (72)</b>	<b>1 (36)</b>	<b>1 (36)</b>

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Установочная лекция.	2	0	0	4	ПК-5 ПК-6
2	Рентгеновская дифрактометрия.	10	4	10	26	ПК-5 ПК-6
3	Кристаллография.	6	14	0	24	ПК-5 ПК-6
4	Рентгеноструктурный анализ.	8	12	16	28	ПК-5 ПК-6
5	Электронная микроскопия.	10	6	10	26	ПК-5 ПК-6
Всего		36	36	36	108	

#### 3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Строение вещества. Предмет и содержание дисциплины.	2	0	0

2	2	<p>Физика рентгеновских лучей. Получение и свойства рентгеновских лучей. Формула Вульфа-Брегга. Рентгеновские спектры. Рентгеновские трубки, синхротронное излучение. Способы регистрации рентгеновского излучения, монохроматизация, типы детекторов. Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Линейные и массовые коэффициенты ослабления, поглощения и рассеяния рентгеновских лучей.. Получение и расчет рентгенограмм. Устройство современных дифрактометров.</p>	4	0	0
3	2	<p>Рентгеновский фазовый анализ (РФА). Базы рентгенофазовых стандартов PDFICDD. Фазовая идентификация. Методы стандартного и нестандартного количественного фазового анализа (КРФА). Точность и чувствительность КРФА. Влияние текстуры и дисперсности. Пробоподготовка. Современное программное обеспечение РФА. Принципы автоматизированного производственного контроля методом КРФА.</p>	6	0	0

4	3	<p>Геометрическая и структурная кристаллография. Элементы симметрии и их взаимодействие. Элементарная ячейка, категории и сингонии. Индексы плоскостей и направлений. Рост и форма кристаллов. Проекция кристалла. Кристаллографический базис. Система трансляций Браве. Понятия теории групп. Классы симметрии (точечные группы). Симметрия дисконтинуума. Пространственные группы. Правильные системы точек. Формальная запись атомной структуры кристаллического вещества.</p>	2	0	0
5	3	<p>Дифракция на кристаллах. Рассеяние кристаллами малого размера. Обратная решетка и ее основные свойства. Радиус-вектор обратной решетки и его свойства. Уравнение Лауэ. Геометрическая интерпретация уравнения Лауэ (сферы Эвальда и разрешения). Уравнение Вульфа-Брегга. Связь обратной решетки со структурой, размером и формой кристалла. Принципы основных методов рентгеноструктурного анализа.</p>	2	0	0



6	3	<p>Основы кинематической теории дифракции. Рассеяние рентгеновских лучей электроном и атомом. Атомная функция рассеяния. Рассеяние непримитивной ячейкой. Структурная амплитуда. Электронная плотность. Интегральные, зональные и сериальные погасания. Влияние поглощения и тепловых колебаний на интенсивность интерференционных максимумов. Формулы для расчета интегральной интенсивности в кинематической теории. Интегральная интенсивность рассеяния поликристаллом.</p>	2	0	0
7	4	<p>Основы рентгеновского структурного анализа. Методы исследования монокристаллов (метод Лауэ, метод вращения, 4-х круговые дифрактометры). Понятие дифракционного класса симметрии. Метод поликристалла. Основные этапы определения атомно-кристаллической структуры. Определение пространственной группы. Определение модели кристаллической структуры. Уточнение кристаллической структуры.</p>	2	0	0

8	4	<p>Основы кристаллохимии. Атомный (ионный) радиус. Плотные упаковки, их поры. Представление структуры через плотные упаковки, координационные полиэдры и сетки. Понятие структурного типа. Стандартная информация о структурном типе. Основные структурные типы элементов и соединений. Базы структурных данных.</p>	2	0	0
9	4	<p>Рентгеноструктурный анализ поликристаллических веществ. Индексирование рентгенограмм. Прецизионное измерение периодов кристаллической решетки. Методы поиска структурных моделей в прямом пространстве. Метод полнопрофильного анализа Ритвельда. Применение метода Ритвельда для КРФА. Анализ твердых растворов.</p>	2	0	0
10	4	<p>Рентгеноструктурный анализ нанокристаллических веществ. Микроструктурные эффекты на рентгенограммах, методы анализа размеров кристаллитов (областей когерентного рассеяния) и микроискажений.</p>	2	0	0

11	5	<p>Растровая электронная микроскопия. Взаимодействие электронов с веществом. Особенности формирования изображения в отраженных, поглощенных, вторичных электронах. Типы электронных микроскопов. Принцип формирования изображения. Оптическая схема микроскопа. Аберрации линз и разрешение микроскопа. Детекторы. Топографический и композиционный контраст. Пробоподготовка. Задачи.</p>	2	0	0
12	5	<p>Электронный микрорентгеноспектральный анализ. Качественный и количественный микроанализ (МРСА). Сканирование и принцип цветокодирования в МРСА. Пробоподготовка. Задачи.</p>	2	0	0
13	5	<p>Оже-спектроскопия. Принципы. Качественная и количественная Оже-спектроскопия. Задачи.</p>	2	0	0

14	5	<p>Дифракционная электронная микроскопия. Уравнения дифракции электронов. Атомная амплитуда рассеяния электронов. Структурная амплитуда рассеяния электронов, условия погасания. Анализ интенсивности дифрагирования электронов, рассеянных на кристалле. Индицирование точечных электронограмм. Эффекты неупругого рассеяния, линии Кикучи. Применение линий Кикучи для уточнения ориентировки кристаллов. Оптическая схема просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ). Типы контраста в ПЭМ. Определение дифракционных условий формирования изображения кристаллов в ПЭМ. Анализ точечных электронограмм. Программное обеспечение QxfordCryoSystem методов электронной микроскопии.</p>	2	0	0
15	5	<p>Другие микроскопические методы изучения состава и структуры. Туннельная, атомно-силовая, рентгеновская дифракционная и абсорбционная микроскопия.</p>	2	0	0
Итого			26	0	0

### 3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	2	Физика рентгеновских лучей. Рентгеновская дифрактометрия.	2	0	0
2	2	Базы рентгенофазовых стандартов PDF ICDD.	2	0	0
3	3	Геометрическая и структурная кристаллография. Аннимационное изучение некоторых групп симметрии	6	0	0
4	3	Дифракция на кристаллах.	4	0	0
5	3	Основы кинематической теории дифракции.	4	0	0
6	4	Основы рентгеновского структурного анализа.	2	0	0
7	4	База структурных данных неорганических веществ COD или ICSD. Представление и кристаллохимический анализ структур.	4	0	0
8	4	Рентгеноструктурный анализ поликристаллических веществ.	2	0	0
9	4	Рентгеноструктурный анализ нанокристаллических веществ.	4	0	0
10	5	Растровая электронная микроскопия.	2	0	0
11	5	Электронный микрорентгеноспектральный анализ.	2	0	0
12	5	Дифракционная электронная микроскопия.	2	0	0
Всего			36	0	0

### 3.4 Лабораторные занятия

№	№	Наименование занятий	Объем в акад. часах
---	---	----------------------	---------------------

п/п	раздела дисциплины		Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	2	Изучение устройства рентгеновского дифрактометра, приготовление образца, съемка и обработка дифрактограмм.	2	0	0
2	2	Рентгенофазовый качественный и количественный анализ материалов и производственных продуктов с помощью ИПС РФА (авторская программа) и БД PDF2.	8	0	0
3	4	Визуализация и кристаллохимический анализ структур с использованием программ Mercury или Diamond.	4	0	0
4	4	Индексирование рентгенограмм и уточнение параметров решетки поликристаллических фаз с использованием программ ITO, POWDER и ИПС РФА.	4	0	0
5	4	Поиск структурных моделей веществ в прямом пространстве с использованием программ FOXили МПГА (авторский генетический алгоритм).	4	0	0
6	4	Метод полнопрофильного анализа Ритвельда. Уточнение кристаллических структур.	2	0	0
7	4	Применение метода Ритвельда для КРФА многофазных смесей (авторская программа МПР).	2	0	0

8	5	Изучение устройства растрового электронного микроскопа; программная обработка микроскопических изображений.	6	0	0
9	5	Методы качественного и количественного микроанализа; система электронно-зондового микроанализа ИНКА (OxfordInstr.).	4	0	0
Итого			26	0	0

## 5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## 6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Якимов И. С., Дубинин П. С.	Кристаллография, рентгенография и микроскопия: метод. указания к практ. занятиям для студентов напр. 150100 "Материаловедение и технология новых материалов"	Красноярск: СФУ, 2012
Л1.2	Якимов И. С., Дубинин П. С.	Кристаллография, рентгенография и микроскопия: учеб.-метод. пособие для самостоят. работы [для студентов спец. 150100 «Материаловедение и технология новых материалов»]	Красноярск: СФУ, 2012
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Горелик С. С., Скаков Ю. А., Расторгуев Л. Н.	Рентгенографический и электронно-оптический анализ: учеб. пособие	Москва: МИСИС, 2002
Л2.2	Егоров-Тисменко Ю. К.	Кристаллография и кристаллохимия: учебник для вузов по спец. "Геология"	Москва: КДУ, 2010
6.3. Методические разработки			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год

ЛЗ.1	Якимов И. С., Дубинин П. С., Залого А. Н.	Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ поликристаллов: Ч. 1. Качественный рентгенофазовый анализ: лаб. практикум: в 2-х ч.	Красноярск: СФУ, 2012
ЛЗ.2	Якимов И. С., Дубинин П. С., Залого А. Н.	Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ поликристаллов: Ч. 2. Количественный рентгенофазовый анализ: лаб. практикум: в 2-х ч.	Красноярск: СФУ, 2012
ЛЗ.3	Якимов И. С., Дубинин П. С.	Кристаллография, рентгенография и микроскопия: метод. указ. к практ. занятиям студентов напр. 150100 "Материаловедение и технология новых материалов"	Красноярск: СФУ, 2012

**7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Э1	Геологический факультет МГУ: Кристаллография: Полный курс [Электронные данные].	<a href="https://sfedu.ru/www/rsu\$persons\$.show_umr?p_per_id=1095&amp;p_prm_id=5949">https://sfedu.ru/www/rsu\$persons\$.show_umr?p_per_id=1095&amp;p_prm_id=5949</a>
Э2		



## **8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Работа с лекциями и книгой. Основной теоретический материал приведен в лекциях. Дополнительную информацию для более полного освоения теоретического материала можно найти в методических разработках по данному курсу и в приведенной литературе. Кроме того, при освоении теоретического материала рекомендуется пользоваться вышеуказанными электронными источниками и ресурсами Интернет.

Особое внимание следует обратить на определение основных понятий курса и содержание основных математических выкладок и формул. Постарайтесь разбирать примеры, которые поясняют такие определения, постройте аналогичные примеры самостоятельно. Используйте справочник по структурному анализу. Полезно также составлять опорные конспекты и при изучении материала дополнять конспект лекций материалами из учебников и пособий. Там же следует отмечать вопросы, выделенные для консультации с преподавателем.

Практические занятия. Для того чтобы практические занятия приносили максимальную пользу, необходимо помнить, что упражнение и решение задач связаны, как правило, с детальным разбором отдельных вопросов теоретического курса. Полезно составить краткий план решения проблемы (задачи). Решение проблемных задач или примеров следует излагать подробно, при необходимости нужно сопровождать комментариями, схемами, чертежами и рисунками.

Лабораторные работы. Требуется последовательное и ясное описание: задачи и исходных данных, краткое описание методики и этапов решения, описание и интерпретация результатов, краткие выводы.

Самопроверка. После изучения определенной темы по записям в конспекте и учебнику, рекомендуется, используя лист опорных сигналов, воспроизвести по памяти определения, формулировки основных положений или доказательств.

Консультации. Когда в процессе самостоятельной работы над изучением теоретического материала или при решении задач у студента возникают вопросы, необходимо обратиться к преподавателю для получения у него разъяснений или указаний.

## **9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)**

### **9.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

9.1.1	Sym&SG – анимационное представление пространственных групп симметрии в PowerPoint (авторская разработка).
9.1.2	Визуализатор кристаллических структур Mercury.
9.1.3	Информационно-поисковая система качественного и количественного рентгенофазового анализа “ИПС РФА” (авторская разработка).
9.1.4	Программы ITO и POWDER для индентификации, определения типа и параметров кристаллической решетки.
9.1.5	ПрограммаMPGA для поиска и уточнения атомной кристаллической структуры химических соединений по порошковым рентгенограммам на базе метода Ритвельда (авторская разработка).
9.1.6	Компьютерный тренажер для решения задач РФА на базе ИПС РФА (авторская разработка).

## 9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	А.С. Храмов, Р.А. Назипов. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Краткий терминологический электронный словарь. – Казань: Изд. Казанского государственного университета, - 2009. - 72 с. <a href="http://shelly.kpfu.ru/portal/docs/F1031488164/14_rsa5_2.pdf">http://shelly.kpfu.ru/portal/docs/F1031488164/14_rsa5_2.pdf</a>
9.2.2	Базы данных дифракционных рентгеновских стандартов фаз PDF2 ICDD или ИПС РФА(авторская разработка).
9.2.3	Базы кристаллоструктурных данных веществ ICSD или COD (Crystallography Open Database: <a href="http://www.crystallography.net/search.html">http://www.crystallography.net/search.html</a> ).

## 10 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Кафедра располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов образовательной деятельности по дисциплине «Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия», в соответствии с требованиями государственного образовательного стандарта подготовки бакалавров по направлению 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов».

Учебные классы и лаборатории кафедры оснащены необходимым оборудованием, позволяющим проводить лекционные, практические и лабораторные занятия в инновационной форме с применением активных методов обучения. Компьютерный класс с интерактивной доской и компьютерами с вышеописанным программным обеспечением дисциплины (есть).

Рентгеновский дифрактометр для подготовки рентгенограмм материалов для лабораторных и самостоятельных работ (есть: XRD-7000 Shimadzu).

Лабораторные занятия проводятся в аудитории 202 л.к. площадью 45,9 м<sup>2</sup>. Площадь, занимаемая лабораторным оборудованием и мебелью, составляет от 6 до 15 м<sup>2</sup> (в зависимости от аудиторной мебели для размещения студентов). Норма площади на одного студента, согласно ГОСТ 12.4.113-82 «Система стандартов безопасности труда. Работы учебные лабораторные. Общие требования безопасности», составляет 4,5 м<sup>2</sup>. Таким образом, вместимость лаборатории – порядка 12 человек. При необходимости за счет задействования для размещения студентов учебной аудитории 203 л.к. можно повысить число занятых в занятии студентов до 15 человек, не более. В связи с изложенным, учебные группы численностью 16 человек и более делятся на подгруппы, состав которых сохраняется до окончания лабораторного практикума. Деление на подгруппы фиксируется в педагогической нагрузке преподавателя.