

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Современные методы РФА и РСА

Код модуля
1161427(1)

Модуль
Методы диагностики материалов

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Киселев Евгений Александрович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	физической и неорганической химии

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

Авторы:

- **Киселев Евгений Александрович, Доцент, физической и неорганической химии**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Современные методы РФА и РСА**

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Практические/семинарские занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Зачет	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	9

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Современные методы РФА и РСА**

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Контрольная работа № 3 Контрольная работа № 4 Контрольная работа № 5 Контрольная работа № 6 Контрольная работа № 7 Контрольная работа № 8 Контрольная работа № 9 Лекции Практические/семинарские занятия

	<p>методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбрать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p>	
<p>ОПК-3 -Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p> <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p>	<p>Зачет</p> <p>Контрольная работа № 1</p> <p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа № 5</p> <p>Контрольная работа № 6</p> <p>Контрольная работа № 7</p> <p>Контрольная работа № 8</p> <p>Контрольная работа № 9</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>
<p>ОПК-1 -Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных</p>	<p>Зачет</p> <p>Контрольная работа № 1</p> <p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа № 5</p> <p>Контрольная работа № 6</p> <p>Контрольная работа № 7</p> <p>Контрольная работа № 8</p> <p>Контрольная работа № 9</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

	направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов	
ПК-1 -Способен проводить синтез и комплексные исследования свойств функциональных и конструкционных материалов, модифицировать имеющиеся экспериментальные методики, выбирая оптимальный способ решения поставленной задачи	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение и возможности модифицирования методов синтеза и исследования свойств функциональных и конструкционных материалов</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов планирования научно-исследовательской работы</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования НИР в целом и отдельных стадий НИР</p> <p>У-1 - Выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы синтеза и исследования свойств функциональных и конструкционных материалов, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов в выбранной области профессиональной деятельности</p>	<p>Зачет</p> <p>Контрольная работа № 1</p> <p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа № 5</p> <p>Контрольная работа № 6</p> <p>Контрольная работа № 7</p> <p>Контрольная работа № 8</p> <p>Контрольная работа № 9</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>
ПК-2 -Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии, физики и/или смежных наук	<p>З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии, физике и смежным областям</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии физики и/или смежных наук</p>	<p>Зачет</p> <p>Контрольная работа № 1</p> <p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа № 5</p> <p>Контрольная работа № 6</p> <p>Контрольная работа № 7</p> <p>Контрольная работа № 8</p> <p>Контрольная работа № 9</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

<p>ПК-3 -Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии и физики</p>	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии и физики З-2 - Демонстрировать понимание принципов анализа и систематизации результатов НИР и НИОКР П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с учетом практического применения результатов П-2 - Иметь опыт анализа полученных экспериментальных и/или теоретических результатов собственного исследования в сравнении с литературными данными У-2 - Систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными</p>	<p>Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Контрольная работа № 3 Контрольная работа № 4 Контрольная работа № 5 Контрольная работа № 6 Контрольная работа № 7 Контрольная работа № 8 Контрольная работа № 9 Лекции Практические/семинарские занятия</p>
<p>ПК-4 -Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения технологических задач З-2 - Демонстрировать понимание принципов организации и планирования материально-технического сопровождения НИР и НИОКР П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей П-2 - Иметь опыт планирования отдельных стадий НИР и НИОКР и работы целом, материально-технического</p>	<p>Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Контрольная работа № 3 Контрольная работа № 4 Контрольная работа № 5 Контрольная работа № 6 Контрольная работа № 7 Контрольная работа № 8 Контрольная работа № 9 Лекции Практические/семинарские занятия</p>

	<p>сопровождения прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-2 - Планировать отдельные стадии и работу в целом, организовать материально-техническое сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p>	
<p>ПК-5 -Способен осуществлять документальное сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Привести примеры нормативных документов по системам стандартизации, разработки и производства химической продукции, проведения прикладных НИР и НИОКР</p> <p>П-1 - Иметь навыки работы с нормативной документацией по разработке и стандартизации химической продукции, проведению и результатам прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>Зачет</p> <p>Контрольная работа № 1</p> <p>Контрольная работа № 2</p> <p>Контрольная работа № 3</p> <p>Контрольная работа № 4</p> <p>Контрольная работа № 5</p> <p>Контрольная работа № 6</p> <p>Контрольная работа № 7</p> <p>Контрольная работа № 8</p> <p>Контрольная работа № 9</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>контрольная работа №1</i>	2,6	20
<i>контрольная работа №2</i>	2,8	20
<i>контрольная работа №3</i>	2,10	20
<i>контрольная работа №4</i>	2,12	20
<i>контрольная работа №5</i>	2,14	20
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.5		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.5		

2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.5		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>контрольная работа №6</i>	2,7	25
<i>контрольная работа №7</i>	2,9	25
<i>контрольная работа №8</i>	2,11	25
<i>контрольная работа №9</i>	2,13	25
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 1		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)

2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Рентгенофазовый анализ.
2. Программный пакет FullProfSuite.
3. Индицирование дифрактограмм.
4. Бесструктурный метод уточнения порошковых дифрактограмм.
5. Выбор пространственной группы.
6. Построение теоретического профиля порошковой дифрактограммы образца с известной кристаллической структурой.
7. Решение кристаллических структур.
8. Уточнение порошковых дифрактограмм методом Ритвелда.
9. Построение кристаллических структур.

Примерные задания

Определить фазовый состав образца неизвестного химического состава по его порошковой дифрактограмме.

Определить фазовый состав образца известного химического состава по его порошковой дифрактограмме.

Определить рефлексы и выбрать точки фона порошковой дифрактограммы в программе WinPlotr.

Провести индицирование дифрактограммы однофазного образца с помощью программ DicVol, Treog и сравнить результаты.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы однофазного образца CeO₂

бесструктурным методом.

По результатам уточнения порошковой дифрактограммы однофазного образца бесструктурным методом выбрать наиболее подходящую(ие) пространственную(ые) группу(ы).

Решить кристаллическую структуру образца CeO_2 методом Паттерсона по данным порошковой дифрактометрии.

Уточнить порошковую дифрактограмму образца CeO_2 методом Ритвелда по модели кристаллической структуры, определенной методом Паттерсона.

Построить модель кристаллической структуры образца CeO_2 по результатам уточнения его порошковой дифрактограммы методом Ритвелда.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа № 1

Примерный перечень тем

1. Рентгенофазовый анализ.

Примерные задания

Определить фазовый состав образца неизвестного химического состава по его порошковой дифрактограмме в программе Match! с использованием БД COD.

Определить фазовый состав образца известного химического состава по его порошковой дифрактограмме в программе Match! с использованием БД COD.

Определить фазовый состав образца с известной симметрией фаз по его порошковой дифрактограмме в программе Match! с использованием БД COD.

Определить фазовый состав образца по его порошковой дифрактограмме, содержащей рефлексы от примесного излучения, в программе Match! с использованием БД COD.

Определить фазовый состав образца каталитического материала по его порошковой дифрактограмме, содержащей рефлексы от примесного излучения, в программе Match! с использованием БД COD.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Контрольная работа № 2

Примерный перечень тем

1. Индексирование дифрактограмм.

Примерные задания

Провести индексирование дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ с помощью программ DicVol, Treor, ITO и сравнить результаты.

Провести индексирование дифрактограммы однофазного образца La_2NiO_4 с помощью программ DicVol, Treor, ITO и сравнить результаты.

Провести индексирование дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ с помощью программ DicVol, Treor, ITO и сравнить результаты.

Провести индиферирование дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ в программе DicVol, если известна его плотность.

Провести индиферирование дифрактограммы однофазного образца La_2NiO_4 в программе DicVol, если известна его плотность.

Провести индиферирование дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ в программе DicVol, если известна его плотность.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.3. Контрольная работа № 3

Примерный перечень тем

1. Бесструктурный метод уточнения порошковых дифрактограмм.

Примерные задания

Провести уточнение порошковой дифрактограммы однофазного образца La_2NiO_4 бесструктурным методом.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ бесструктурным методом.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы однофазного образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ бесструктурным методом.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы двухфазного образца TiO_2 бесструктурным методом.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы образца каталитического материала бесструктурным методом и оценить размеры областей когерентного рассеяния каждой из фаз.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы образца ZrO_2 бесструктурным методом.

Провести уточнение порошковой дифрактограммы трехфазного образца бесструктурным методом.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.4. Контрольная работа № 4

Примерный перечень тем

1. Функция разрешения порошкового дифрактометра.

Примерные задания

Найти функцию разрешения для дифрактометра XRD-7000 по результатам уточнения профильных параметров (U, V, W, X, Y) функции Thompson-Cox-Hastings pseudo-Voigt стандартного образца CeO_2 бесструктурным методом.

Найти функцию разрешения для дифрактометра ДРОН-6 по результатам уточнения профильных параметров (U, V, W, X, Y) функции Thompson-Cox-Hastings pseudo-Voigt стандартного образца CeO_2 бесструктурным методом.

Найти функцию разрешение для дифрактометра Equinox 3000 по результатам уточнения профильных параметров (U, V, W, X, Y) функции Thompson-Cox-Hastings pseudo-Voigt стандартного образца CeO_2 бесструктурным методом.

Задать функцию разрешения для дифрактометра Equinox 3000 по результатам уточнения отдельных рефлексов стандартного образца CeO_2 .

Задать функцию разрешения для дифрактометра XRD-7000 по результатам уточнения отдельных рефлексов стандартного образца CeO_2 .

Задать функцию разрешения для дифрактометра DRON-6 по результатам уточнения отдельных рефлексов стандартного образца CeO_2 .

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.5. Контрольная работа № 5

Примерный перечень тем

1. Выбор пространственной группы.

Примерные задания

Выбрать пространственную(ые) группу(ы) с помощью приложения Check Group для образца сложного оксида $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ по результатам уточнения его порошковой дифрактограммы по бесструктурному методу.

Выбрать пространственную группу(ы) с помощью приложения Check Group для образца сложного оксида $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ по результатам уточнения его порошковой дифрактограммы по бесструктурному методу.

Выбрать пространственную группу(ы) с помощью приложения Check Group для образца сложного оксида La_2NiO_4 по результатам уточнения его порошковой дифрактограммы по бесструктурному методу.

Выбрать пространственную(ые) группу(ы) с применением международных таблиц по кристаллографии для образца сложного оксида La_2NiO_4 .

Выбрать пространственную(ые) группу(ы) с применением международных таблиц по кристаллографии для образца сложного оксида $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$.

Выбрать пространственную(ые) группу(ы) с применением международных таблиц по кристаллографии для образца сложного оксида $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.6. Контрольная работа № 6

Примерный перечень тем

1. Построение теоретических профилей порошковой дифрактограммы образца с известной кристаллической структурой.

Примерные задания

Построить теоретический профиль порошковой дифрактограммы образца La_2NiO_4 с известной кристаллической структурой.

Построить теоретический профиль порошковой дифрактограммы образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ с известной кристаллической структурой.

Построить теоретический профиль порошковой дифрактограммы образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ с известной кристаллической структурой.

Построить теоретический профиль порошковой дифрактограммы образца CeO_2 с известной кристаллической структурой.

Построить теоретический профиль порошковой дифрактограммы двухфазного образца 90% $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и 10% RuO_2 , если известны их кристаллические структуры и заданы средние размеры областей когерентного рассеяния.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.7. Контрольная работа № 7

Примерный перечень тем

1. Решение кристаллических структур методом Паттерсона.

Примерные задания

Решить кристаллическую структуру образца La_2NiO_4 методом Паттерсона по данным порошковой дифрактометрии.

Решить кристаллическую структуру образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ методом Паттерсона по данным порошковой дифрактометрии.

Решить кристаллическую структуру образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ методом Паттерсона по данным порошковой дифрактометрии.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.8. Контрольная работа № 8

Примерный перечень тем

1. Уточнение порошковых дифрактограмм методом Ритвелда для одной фазы.
2. Уточнение порошковых дифрактограмм методом Ритвелда для нескольких фаз.

Примерные задания

Уточнить параметры кристаллической структуры образца La_2NiO_4 методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры образца $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры образца $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры и массовую долю для каждой из кристаллических фаз в смеси $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{F}_{14}$ и CaF_2 методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры и массовую долю для каждой из кристаллических фаз в смеси LiFePO_4 и Fe_2O_3 методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры, средние размеры областей когерентного рассеяния и массовую долю для каждой из кристаллических фаз в смеси $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и RuO_2 методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

Уточнить параметры кристаллической структуры, средние размеры областей когерентного рассеяния и массовую долю для каждой из кристаллических фаз в смеси рутила и анатаза методом Ритвелда по данным порошковой рентгеновской дифракции.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.9. Контрольная работа № 9

Примерный перечень тем

1. Построение моделей кристаллических структур.

Примерные задания

Построить модель кристаллической структуры для фазы $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{F}_{14}$ в программе Vesta в размере одной элементарной ячейки.

Построить модель кристаллической структуры для фазы $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{F}_{14}$ в программе Vesta в размере одной элементарной с выделением полиэдров $[\text{MeFx}]$.

Построить модель кристаллической структуры для фазы Al_2O_3 в программе Vesta в размере одной элементарной ячейки.

Построить модель кристаллической структуры для фазы LiFePO_4 в программе Vesta.

Построить модель кристаллической структуры для фазы LiFePO₄ в программе FPStudio.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Физические законы и принципы, лежащие в основе дифракционных методов исследования кристаллических веществ.
2. Какую информацию об образце можно извлечь из его порошковой рентгеновской дифрактограммы.
3. Принципы РФА. Программные пакеты и базы данных, используемые для идентификации фаз.
4. Индексирование дифрактограмм, правила погасания, программные пакеты, международные таблицы по кристаллографии.
5. Принципы, лежащие в основе полнопрофильных методов обработки рентгеновских данных.
6. Элементы кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей: атомный фактор рассеяния, относительные координаты атомов, структурный фактор, температурный фактор.
7. Рентгеноструктурный анализ. Карты электронной плотности. Метод Паттерсона.
8. Оценка размера кристаллитов и микронапряжений в исследуемом образце по изотропной и анизотропной моделям.
9. Критерии недостоверности уточнения дифрактограмм: R-факторы.
10. Алгоритмы уточнения рентгеновских порошковых дифрактограмм полнопрофильными методами.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.