

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ

**Код модуля**  
1161933(1)

**Модуль**  
Структурная химия и современные концепции  
неорганической химии

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Петрова Софья Александровна	кандидат физико-математических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

Авторы:

- Петрова Софья Александровна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	6	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Лабораторные занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	3
		Коллоквиум	3
		Домашняя работа	1
		Расчетно-графическая работа	2
		Отчет по лабораторным работам	1

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ

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 П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных	Коллоквиум № 2 Контрольная работа № 2 Лабораторные занятия Лекции Экзамен

	экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники	
ОПК-3 -Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области	Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ	Коллоквиум № 3 Контрольная работа № 3 Лабораторные занятия Лекции Экзамен
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	П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целей подходов и методов У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целей подходов и методов	Коллоквиум №1 Контрольная работа №1 Лабораторные занятия Лекции Экзамен
ПК-1 -Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов решения научно-исследовательских задач в выбранной области профессиональной деятельности З-2 - Демонстрировать понимание принципов планирования научно-исследовательской работы	Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам Экзамен

	<p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения поставленных задач и прогнозирования результатов исследования, исходя из наличия материальных и временных ресурсов</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования НИР в целом и отдельных стадий НИР</p>	
<p>ПК-2 -Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<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 и смежным областям</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Экзамен</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, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии или смежных науках</p> <p>П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с учетом практического применения результатов</p>	<p>Лабораторные занятия</p> <p>Расчетно-графическая работа №1</p> <p>Экзамен</p>
<p>ПК-4 -Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний</p>	<p>Лабораторные занятия</p> <p>Расчетно-графическая работа № 2</p> <p>Экзамен</p>

	(из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР	
--	--	--

### 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

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5</b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>Коллоквиум № 1</i>	8,10	10
<i>Контрольная работа № 1</i>	8,6	10
<i>Контрольная работа № 2</i>	8,9	10
<i>Расчетно-графическая работа № 1</i>	8,8	15
<i>Домашняя работа</i>	8,7	10
<i>Коллоквиум № 2</i>	8,12	10
<i>Расчетно-графическая работа № 2</i>	8,13	15
<i>Коллоквиум № 3</i>	8,16	10
<i>Контрольная работа № 3</i>	8,15	10
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.5</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.5</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено</b>		
<b>Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.5</b>		
<b>Текущая аттестация на лабораторных занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>

<i>Отчет по лабораторной работе</i>	8,17	100
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено</b>		
<b>Текущая аттестация на онлайн-занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено</b>		

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

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

## 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

<b>Результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам</b>
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	<p>Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов.</p> <p>Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения.</p> <p>Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.</p>
-------------------	---

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. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Качественный фазовый анализ
  2. Количественный фазовый анализ
  3. Расчет параметров элементарной ячейки
  4. Индицирование
  5. Полнопрофильный анализ по методу Ритвельда
- 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 качественный фазовый состав смеси.

Определить количественный фазовый состав смеси.

LMS-платформа – не предусмотрена

##### 5.2.2. Контрольная работа № 2

Примерный перечень тем

1. Индицирование

Примерные задания

Выполнить индицирование дифрактограммы вещества с высшей сингонией методом отношений.

Выполнить индицирование дифрактограммы вещества с высшей сингонией с применением соответствующего программного обеспечения.

Выполнить индицирование дифрактограммы вещества со средней сингонией с применением соответствующего программного обеспечения.

LMS-платформа – не предусмотрена

##### 5.2.3. Контрольная работа № 3

Примерный перечень тем

1. Полнопрофильный анализ

Примерные задания

Уточнить структуру соединения методом полнопрофильного анализа по Ритвельду.

LMS-платформа – не предусмотрена

##### 5.2.4. Коллоквиум №1

Примерный перечень тем

1. Природа и свойства рентгеновских лучей. Структура кристалла

Примерные задания

Каково оптимальное напряжение на рентгеновской трубке?

Как изменяется объем вещества, участвующего в рассеянии, по мере увеличения угла между падающим и отраженным лучами ?

Энергия какого излучения выше:  $K\alpha_1$  или  $K\beta$ ?

Сколько существует пространственных групп?

Запишите координаты атомов в структуре в явном виде, опираясь на запись через позиции Вайкофа.

При выборе элементарной ячейки, каким условиям отвечает требование «максимальной симметрии»?

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.5. Коллоквиум № 2

Примерный перечень тем

1. Постановка эксперимента. Теоретический расчет дифрактограммы

Примерные задания

Какая из дифрактограмм снималась в геометрии расходящегося пучка, а какая в геометрии параллельного? Как объяснить изменение полуширины линии?

Что произойдет с линиями на дифрактограмме, если плоскость образца сместится наружу из центра круга

Информация из какой области углов дифрактограммы является наиболее важной при решении следующих задач: а) фазовый анализ; б) расчет параметров элементарной ячейки; в) индексирование дифрактограммы; г) полнопрофильный анализ дифрактограммы?

Для структурного типа CsCl проанализировать интенсивность отражений, сумма индексов которых четное и нечетное число, сравнив структуры, образованные атомами с близкими или далекими атомными номерами и ответить на следующие вопросы:

1. Как меняется интенсивность если сумма индексов - четное число, если - нечетное число? Объяснить почему.

2. Объяснить появление сверхструктурных рефлексов в структурах

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.6. Коллоквиум № 3

Примерный перечень тем

1. Метод Ритвельда

Примерные задания

Сущность метода полнопрофильного анализа (ППА) по Ритвельду.

Особенности сбора данных (постановки эксперимента) для ППА.

От чего зависит полуширина линий на дифрактограмме?

Какие профильные функции Вы знаете?

Перечислите способы контроля процедуры уточнения методом ППА.

Структурно независимое ("бесструктурное") уточнение.

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.7. Домашняя работа

Примерный перечень тем

#### 1. Расчет параметров элементарной ячейки

Примерные задания

Рассчитать параметры элементарной ячейки твердого раствора (даются дифрактограммы твердых растворов разного состава, снятые при разных температурах)  
LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.8. Расчетно-графическая работа №1**

Примерный перечень тем

1. Определение концентрационных границ области несмешиваемости твердых растворов в квазибинарной системе

Примерные задания

Рассчитать параметры элементарных ячеек (ПЭЯ) двух твердых растворов (А и В) во всем концентрационном интервале.

Построить концентрационные зависимости ПЭЯ.

Определить пределы взаимной растворимости компонентов А и В.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.9. Расчетно-графическая работа № 2**

Примерный перечень тем

1. Расчет коэффициентов термического расширения

Примерные задания

Рассчитать параметры элементарной ячейки (ПЭЯ) вещества при разных температурах.

Построить графики зависимости ПЭЯ от температуры.

Рассчитать коэффициенты термического расширения по соответствующим кристаллографическим осям и коэффициент объемного расширения.

LMS-платформа – не предусмотрена

### **5.2.10. Отчет по лабораторным работам**

Примерный перечень тем

1. Качественный фазовый анализ

2. Количественный фазовый анализ

3. Расчет параметров элементарной ячейки

4. Уточнение кристаллической структуры вещества методом Ритвельда

Примерные задания

Используя соответствующее программное обеспечение:

Определить качественный фазовый состав смеси

Определить количественный фазовый состав смеси

Выполнить расчет ПЭЯ методом наименьших квадратов

Выполнить уточнение кристаллической структуры вещества методом Ритвельда

LMS-платформа – не предусмотрена

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

### **5.3.1. Экзамен**

Список примерных вопросов

1. Определение параметров элементарной ячейки. Сущность метода. Систематические и случайные погрешности. Особенности определения ПЭЯ методом полнопрофильного анализа.

2. Полнопрофильный анализ по методу Ритвельда. Сущность метода. Основные положения. Процедура уточнения кристаллической структуры.

3. Индицирование дифрактограмм. Сущность и назначение. Метод отношений. Ограничения использования.

4. Выражение интегральной интенсивности дифракционного максимума для поликристалла. Объясните природу каждого вклада. Какие формулы выражают зависимость интенсивности дифракционного луча от кристаллической структуры?

5. Рентгенофазовый анализ. Сущность метода. Метод Финка. Метод Ханавальта. Количественный фазовый анализ.

LMS-платформа – не предусмотрена

#### 5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения	Контрольно-оценочные мероприятия
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	ПК-1	З-1	Отчет по лабораторным работам