

*Приложение к приказу первого проректора
по учебной и научной работе*

от _____ № _____

**Правительство Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный университет**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Атомная структура

вещества: дифракция нейтронного и синхротронного излучения

Atomic structure of matter: diffraction of neutron and synchrotron radiation

Язык(и) обучения

_____ *русский* _____

Трудоёмкость (границы трудоёмкости) в зачетных единицах: _____ 3 _____

Регистрационный номер рабочей программы: _____

Раздел 1. Характеристики учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Дифракция излучения (рентгеновского/синхротронного или нейтронного) на кристалле является наиболее развитым экспериментальным методом анализа атомной структуры. С ее помощью удастся восстановить структуру с точностью, достаточной для локализации отдельных атомов, и изучить структурные перестройки под действием внешних условий. Общим названием совокупности экспериментальных и математических приемов, позволяющих определить структуру кристалла, а также способов представления полученной информации, является “дифракционный структурный анализ”. В курсе лекций будут рассмотрены вопросы, необходимые для понимания современного состояния дифракционного структурного анализа с применением синхротронного излучения и тепловых нейтронов. Итак, целью изучения дисциплины является получение углубленных знаний по применению дифракции тепловых нейтронов и синхротронного излучения для изучения атомной структуры вещества и ознакомление с возможностями применения дифракции неполяризованных нейтронов для анализа магнитной структуры.

1.2. Требования к подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)

Данный курс читается после курсов «Симметрия, структура и свойства твердых тел – кристаллография и кристаллофизика», «Теория взаимодействия синхротронного (рентгеновского) и нейтронного излучения с веществом» и является логическим продолжением уже прочитанных курсов. Кроме того, студенты, приступающие к прослушиванию курса, уже имеют практику по рентгеновской, синхротронной и нейтронной физике, а именно, в практическом использовании «Метода порошковой синхротронной и рентгеновской дифракции для структурного анализа материалов», «Метода монокристалльной синхротронной и рентгеновской дифракции для структурного анализа материалов», «Метода порошковой нейтронной дифракции для структурного анализа материалов» и «Метода монокристалльной нейтронной дифракции для структурного анализа материалов».

1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать методики исследования структурных и магнитных свойств материалов с использованием нейтронов и синхротронного излучения;
- уметь разрабатывать идеологию эксперимента на современном оборудовании синхротронов и нейтроноводных залов;

иметь навыки анализа полученных экспериментальных данных с использованием пакетов программ *FULLPROF SUITE*, *WinPLOTR*

1.4. Перечень активных и интерактивных форм учебных занятий

- Информационная лекция – последовательное изложение материала в дисциплинарной логике, осуществляемое преимущественно вербальными средствами (монолог преподавателя) (48 часов).
- Самостоятельная работа в присутствии преподавателя (15 часов).
- Самостоятельная работа с использованием методических материалов (5 часов).

Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

2.1. Организация учебных занятий

2.1.1 Основной курс

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																		
Период обучения (модуль)	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа				Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость	
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам.раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)	итоговая аттестация (сам.раб.)			
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ																		
очная форма обучения																		
Семестр 2	48		2					2			15			36			68	3
	2-10		2-10					2-10			2-10			2-10				
ИТОГО	48		2					2			15			23			68	3

Формы текущего контроля успеваемости, виды промежуточной и итоговой аттестации			
Период обучения (модуль)	Формы текущего контроля успеваемости	Виды промежуточной аттестации	Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ			
очная форма обучения			
Семестр 2		экзамен	

2.2. Структура и содержание учебных занятий

Основной курс Основная траектория Очная форма обучения

Период обучения (модуль): **Семестр 2**

№ п/п	Наименование темы (раздела, части)	Вид учебных занятий	Количество часов
1	Введение	лекции	1
2	МОДУЛЬ 1. 1. Дифракция нейтронного и синхротронного излучения в фундаментальных и прикладных исследованиях в физике и химии конденсированных состояний и материаловедении. 1.1. Краткий обзор применения дифракции тепловых	лекции	5

	<p>нейтронов и синхротронного излучения для изучения структуры вещества.</p> <p>1.2. Светосила и потоки нейтронного и рентгеновского излучений. Сравнение методов структурных исследований по масштабу объектов. Длины рассеяния и поглощения тепловых нейтронов и рентгеновских лучей.</p> <p>1.3. Сравнение нейтронного и рентгеновского излучений в общем случае и с точки зрения дифракции. Преимущества и недостатки обоих методов. Важность и особенности комплиментарного использования рентгеновского/синхротронного излучения и нейтронов. Области применения дифракции синхротронного и нейтронного излучений.</p> <p>2. Основные экспериментальные методики, использующие дифракцию синхротронного излучения и нейтронов.</p> <p>2.1. Аппаратурное воплощение методик, использующих дифракцию синхротронного излучения и нейтронов. Почему не существует универсального нейтронного спектрометра? Двухосные дифрактометры.</p> <p>2.2. Метод монокристалльной дифракции.</p> <p>2.3. Метод порошковой дифракции.</p>		
3	<p>МОДУЛЬ 2.</p> <p>3. Общие понятия о симметрии периодических структур и дифракции излучения на периодических структурах.</p> <p>3.1. Симметрия периодических структур.</p> <p>3.2. Дифракции излучения на периодических структурах. Принципы структурного анализа кристаллов.</p> <p>3.3. Общие условия возникновения дифракционной картины. Влияние когерентности процесса рассеяния и пространственной периодичности рассеивающих центров на контраст.</p> <p>4. Дифракция излучений на периодических структурах.</p> <p>4.1. Рассеяние электромагнитного излучения атомом. Ядерное рассеяние нейтронов кристаллами.</p> <p>4.2. Рассеяние на идеальной периодической структуре. Структурный фактор элементарной ячейки кристалла. Специфика рентгеновских лучей, электронов и нейтронов при дифракции на кристалле.</p> <p>4.3. Геометрия дифракционной картины. Векторный треугольник. Интерпретация дифракции на кристалле как отражения от кристаллографических плоскостей. Формула Вульфа-Брэгга. Построение Эвальда. Сферы отражения и ограничения.</p> <p>5. Формализм и некоторые уравнения дифракции.</p>	лекции	14

	<p>5.1. Упругое рассеяние. Кинематической теории (первое борновское приближение). Формула Дебая. Амплитуда рассеяния конечного кристалла.</p> <p>5.2. Структурный фактор.</p> <p>5.3. Интенсивность рассеяния конечного кристалла. Интенсивность рассеяния реального кристалла.</p> <p>6. Формализм и некоторые уравнения дифракции на поликристаллическом материале.</p> <p>6.1. Порошковое усреднение.</p> <p>6.2. Профиль порошковой дифрактограммы.</p> <p>6.3. Деформированные кристаллы. Эффекты размера зерна и напряжений в обратном пространстве.</p> <p>7. Структурная обработка экспериментальных данных.</p> <p>7.1. Структурное решение. Методы обратного пространства. Методы в прямом пространстве.</p> <p>7.2. Практическая реализация метода Ритвельда.</p> <p>7.3. Структурная информация, содержащаяся в интегральных интенсивностях.</p>		
4	<p>МОДУЛЬ 3.</p> <p>8. Интенсивности дифракционных спектров.</p> <p>8.1. Анализ интенсивности дифракционных спектров. Интенсивность дифракционного пика как свертка сечения рассеяния и функции разрешения. Интегральная интенсивность пика.</p> <p>8.2. Введение поправок в формулы для интегральной интенсивности. Фактор поглощения. Учет вторичной экстинкции. Тепловой фактор.</p> <p>8.3. Изотропное и анизотропное приближения. Зависимость $V(T)$ в дебаевском приближении. Связь теплового фактора с фононным спектром и теплоемкостью кристалла.</p> <p>9. Теория и методика дифракционных методов.</p> <p>9.1. Монокристалльный дифракционный эксперимент.</p> <p>9.2. Порошковая дифракция с постоянной длиной волны.</p> <p>9.3. Время-пролетная порошковая нейтронная дифракция.</p> <p>10. Методы обработки данных дифракционного эксперимента.</p> <p>10.1. Структурные данные монокристалльной дифракции.</p> <p>10.2. Структурные данные из порошковой дифракции. Почему не используется метод монокристалльной дифракции? Какие типы структуры можно проанализировать?</p>	лекции	12

	<p>10.3. Какой тип данных является наилучшим?</p> <p>11. Метод Ритвельда.</p> <p>11.1. Что такое Ритвельдовская обработка?</p> <p>11.2. Структурные и профильные параметры.</p> <p>11.3. Стандартные отклонения и R-факторы.</p>		
5	<p>МОДУЛЬ 4.</p> <p>12. Магнитное рассеяние нейтронов. Нейтронография магнетиков (I).</p> <p>12.1. Магнитное брэгговское рассеяние неполяризованных нейтронов.</p> <p>12.2. Описание магнитных структур. Формализм для описания магнитных структур. Магнитный структурный фактор.</p> <p>12.3. Симметричный анализ магнитных структур.</p> <p>13. Нейтронография магнетиков (II).</p> <p>13.1. Различные способы обработки магнитных структур.</p> <p>13.2. Стадии определения магнитной структуры по данным монокристаллической дифракции.</p> <p>13.3. Стадии определения магнитной структуры по данным порошковой дифракции.</p> <p>14. Нейтронография магнетиков (III).</p> <p>14.1. Определение магнитной структуры в сложных системах.</p> <p>14.2. Проблемы обработки магнитной структуры при использовании порошковой дифракции.</p> <p>14.3. Решение магнитных структур, где возможно не может быть единственного решения.</p>	лекции	10
6	<p>МОДУЛЬ 5.</p> <p>15. Важнейшие прикладные применения дифракционных методов (I).</p> <p>15.1. Наблюдение водорода.</p> <p>15.2. Идентификация фазового состава (минералогия). Количественный анализ (химический и фазовый анализ).</p> <p>15.3. Определение текстуры поликристаллических веществ.</p> <p>16. Важнейшие прикладные применения дифракционных методов (II).</p> <p>16.1. Применение дифракционных методов для анализа остаточных напряжений.</p> <p>16.2. Измерение остаточных напряжений в условиях высокого разрешения.</p>	лекции	6

	16.3. Микроструктура и дефекты.		
7	Методы обработки данных дифракционного эксперимента.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	2
8	Индексирование дифрактограмм	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
9	Введение в семейство программ <i>FULLPROF SUITE</i> . <i>WinPLOT</i> : программа обращения к <i>FullProf Suite</i>	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	2
10	Программа для анализа дифрактограмм: <i>FullProf</i>	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
11	Стратегия ритвельдовской обработки		2
12	Применение программ <i>FULLPROF SUITE</i> для определения и обработки магнитных структур.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3

Раздел 3. Обеспечение учебных занятий

3.1. Методическое обеспечение

3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины

Для освоения дисциплины студенту предоставляется адаптированная программа курса, содержащая разделы 2, 3.1 и 3.4 данной Рабочей программы, а также электронная презентация всех лекций в формате PPT или PDF.

3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы

Для самостоятельной работы студенты должны обеспечиваться:

- программой курса, адаптированной для студента;
- перечнем заданий для самостоятельной работы;
- методическими указаниями для использования программных продуктов *FULLPROF SUITE* и *WinPLOT*

3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Проведение промежуточной аттестации будет осуществляться в виде устного экзамена и оцениваться на основании Балльно-рейтинговой системы. Целями введения балльно-рейтинговой системы являются стимулирование систематической учебной работы студентов в течение всего периода обучения, повышение объективности оценки знаний студентов и мотивация их к систематической самостоятельной работе по изучению дисциплины в течение семестра.

Общее максимальное количество баллов – 100, из них за посещение и работу на лекциях – 10 баллов, за работу, выполняемую в присутствии преподавателя – 20 баллов, за ответ на вопросы во время промежуточной аттестации – 70 баллов.

Экзаменационный билет содержит два вопроса, на каждый из которых студент должен привести развернутый конспект с планом ответа, необходимыми определениями, иллюстрациями, формулами и зависимостями. Для подготовки к ответу по билету дается не более 1 часа. Затем, в устной форме студент, пользуясь конспектом, должен связно и исчерпывающе изложить содержание ответа.

В ходе ответа преподавателем могут быть заданы студенту уточняющие вопросы по билету. На обдумывание ответа на дополнительные вопросы студенту дается не более 10 минут на каждый ответ. В общей сложности ответ студента не должен превышать 40 минут без учета времени на обдумывание дополнительных вопросов.

3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)

Перечень билетов для проведения промежуточной аттестации студентов.

Билет 1.

1. Преимущества и недостатки методов дифракция нейтронного и синхротронного излучения. Области применения дифракции синхротронного и нейтронного излучений.

2. Наблюдение водорода.

Билет 2.

1. Почему не существует универсального нейтронного спектрометра?

2. Метод Ритвельда

Билет 3.

1. Общие условия возникновения дифракционной картины. Влияние когерентности процесса рассеяния и пространственной периодичности рассеивающих центров на контраст.

2. Время-пролетная порошковая нейтронная дифракция.

Билет 4.

1. Рассеяние электромагнитного излучения атомом. Ядерное рассеяние нейтронов кристаллами.

2. Количественный анализ (химический и фазовый анализ).

Билет 5.

1. Кинематическая теория дифракции. Интенсивность рассеяния реального кристалла.

2. Стадии определения магнитной структуры по данным порошковой дифракции.

Билет 6.

1. Порошковое усреднение.
2. Способы обработки магнитных структур.

Билет 7.

1. Структурная информация, содержащаяся в интегральных интенсивностях.
2. Магнитное брэгговское рассеяние неполяризованных нейтронов.

Билет 8.

1. Монокристалльный дифракционный эксперимент.
2. Структурная информация, содержащаяся в дифрактограмме.

Билет 9.

1. Порошковая дифракция с постоянной длиной волны.
2. Структурные данные монокристалльной дифракции.

Билет 10.

1. Структурные данные из порошковой дифракции
2. Применение дифракционных методов для анализа остаточных напряжений. Микроструктура и дефекты.

3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

Анкета-отзыв на дисциплину «Метаматериалы и методики малоугловой дифракции в исследовании их функциональных свойств»

Просим Вас заполнить анкету-отзыв по прочитанной дисциплине. Обобщенные данные анкет будут использованы для ее совершенствования. По каждому вопросу проставьте соответствующие оценки по шкале от 1 до 10 баллов (**обведите** выбранный Вами балл). В случае необходимости впишите свои комментарии.

1. Насколько Вы удовлетворены содержанием дисциплины в целом?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий _____

2. Насколько Вы удовлетворены общим стилем преподавания?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий _____

3. Как Вы оцениваете качество подготовки предложенных методических материалов?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий _____

4. Какой из модулей (разделов) дисциплины Вы считаете наиболее полезным, ценным с точки зрения дальнейшего обучения и/или применения в последующей практической деятельности?

Комментарий _____

5. Что бы Вы предложили изменить в методическом и содержательном плане для совершенствования преподавания данной дисциплины?

Комментарий _____

СПАСИБО!

3.2. Кадровое обеспечение

3.2.1 Образование и (или) квалификация преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий

К чтению лекций должны привлекаться преподаватели, имеющие ученую степень и/или ученое звание, имеющие опыт планирования и организации учебного процесса, а также главные и ведущие специалисты в этой области.

3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Требования не предъявляются

3.3. Материально-техническое обеспечение

3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий

Стандартно оборудованные лекционные аудитории для проведения интерактивных лекций: видеопроектор, экран настенный, др. оборудование или компьютерный класс.

3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования

Для проведения занятия необходимы: видеопроектор, ноутбук, переносной экран. В компьютерном классе должны быть установлены средства MS Office 2007: Word, PowerPoint и др. (допустима версия MS Office 2003).

3.3.3 Характеристики специализированного оборудования

Рабочие места преподавателя и студентов должны быть оснащены оборудованием не ниже: Pentium III-800/ОЗУ-256 Мб / Video-32 Мб / Sound card – 16bit /Headphones / HDD 80 Гб / CD-ROM – 48x / Network adapter – 10/100/ Мбс / SVGA – 19”

3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения

Каждый обучающийся во время занятий и самостоятельной подготовки должен быть обеспечен рабочим местом в компьютерном классе с выходом в Интернет и корпоративную сеть факультета.

3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов

Фломастеры цветные, губки, бумага формата А4, канцелярские товары, картриджи принтеров, диски, флеш-накопители и др. в объёме, необходимом для организации и проведения занятий, по заявкам преподавателей, подаваемым в установленные сроки.

3.4. Информационное обеспечение

3.4.1 Список обязательной литературы

1. Джесси Рассел «Дифракционные методы» Издательство: "VSD", 2012.
2. Г.В. Фетисов «Синхротронное излучение. Методы исследования структуры вещества», М: ФИЗМАТЛИТ, 2007.
3. Л.А. Асланов, Е.Н. Треушников «Основы теории дифракции рентгеновских лучей. (Рассмотрение в объеме, необходимом для изучения электронного строения монокристаллов)», М: Изд. МГУ, 1985.
4. Д.М. Васильев «Дифракционные методы исследования структур», СПб. Изд-во СПбГТУ, 1998.

5. В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич «Теория рассеяния рентгеновских лучей» М., МГУ, 1978.
6. И.И. Гуревич, Л.В. Тарасов, «Физика нейтронов низких энергий», М: Наука, 1965
7. Ю.З. Нозик, Р.П. Озеров, К. Хениг «Структурная нейтронография» М., Атомиздат, 1979.

3.4.2 Список дополнительной литературы

1. В.Л. Аксенов, А.М. Балагуров. Дифракция нейтронов на импульсных источниках. «Успехи физических наук» 186, №3, 2016.
2. Сатдарова Ф.Ф. Дифракционный анализ деформированных металлов. Теория, методика, программное обеспечение. Издательство: Инфра-М, РИОР. Серия: Научная мысль, 2016г.
3. Ю.А.Изюмов, В.Е.Найш, Р.П.Озеров. Нейтронография магнетиков. "Атомиздат", М. 1981
4. Лабораторный практикум по направлению "Исследования конденсированных сред ядерно-физическими методами".
Учебное пособие. Под ред. В.Л.Аксенова, Москва, МГУ, 1998.
5. «Рассеяние тепловых нейтронов» под ред. П.Игелстаффа, М.: Атомиздат, 1970.
6. Асланов Л.А. Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. Москва: Изд. МГУ. 1983. 288 с.
7. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений, М., Высшая школа, 1989. – 182 с.
8. Чернышев В.В. "Определение кристаллических структур методами порошковой дифракции". // Изв. Академии наук. Серия химическая. 2001, № 12, с. 2174-2190.

3.4.3 Перечень иных информационных источников

Интернет-страницы крупнейших научных нейтронных и синхротронных центров мира и таких международных научных организациях, как International Union of Crystallography (IUCr), European Crystallographic Association (ECA), European Neutron Scattering Association (ENSA), Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy (NMI³) и др.

Раздел 4. Разработчики программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Курбаков Александр Иванович	д.ф.м.н.	снс	профессор	kurbakov@pnpi.spb.ru +7-960-2340909