

Приложение к приказу первого проректора  
по учебной и научной работе

от \_\_\_\_\_ № \_\_\_\_\_

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

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Атомная и молекулярная динамика: неупругое рассеяние нейтронов и  
синхротронного излучения

Atomic and molecular dynamics: inelastic neutron and X-ray (synchrotron  
radiation) scattering

**Язык(и) обучения**

Русский

Трудоёмкость (границы трудоёмкости) в зачетных единицах: 2

Регистрационный номер рабочей программы: \_\_\_\_\_

Санкт-Петербург

2016

## Раздел 1. Характеристики учебных занятий

### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

Передать студентам общее представление об атомной и молекулярной динамике материалов, включая колебания решетки, релаксационную динамику, диффузионные процессы. Показать особенности динамики наноразмерных, нанонеоднородных и нанокompозитных материалов. Дать представление о методах исследования динамики с использованием методов неупругого рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения. Обучить студентов определению динамических характеристик на основе экспериментально измеряемых спектров с использованием современного математического аппарата и существующего программного обеспечения.

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

Для успешного освоения программы дисциплины «Атомная и молекулярная динамика: неупругое рассеяние нейтронов и синхротронного излучения» студентам необходимо прослушать курсы лекций «Теория взаимодействия синхротронного (рентгеновского) и нейтронного излучения с веществом» и «Симметрия, структура и свойства твердых тел – кристаллография и кристаллофизика».

### 1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать основные принципы неупругого рассеяния нейтронов в конденсированных средах;
- знать методики исследования динамических характеристик конденсированных сред с использованием нейтронов и синхротронного излучения;
- уметь разрабатывать идеологию эксперимента на современном оборудовании синхротронов, стационарных и импульсных нейтронных источников;
- иметь навыки анализа полученных экспериментальных данных с использованием компьютерных программ Reslib, McStas, Unisoft, vTAS, Dave и MFit.

### 1.4. Перечень активных и интерактивных форм учебных занятий

- Информационная лекция – последовательное изложение материала в дисциплинарной логике, осуществляемое преимущественно вербальными средствами (монолог преподавателя) (15 часов).
- Лекция-визуализация – изложение содержания сопровождается презентацией (демонстрацией учебных материалов, представленных в различных знаковых системах, в т.ч. иллюстративных, графических, аудио- и видеоматериалов) (15 часов).
- Самостоятельная работа в присутствии преподавателя (30 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	Всего занятий	Трудовой объём

		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.)			
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																																			
<b>очная форма обучения</b>																																			
Семестр 2 (____ часы кол.студ.)	30		2							2								2										8					64	2	
	2-10		2-10							2-10									2-10									2-10							
<b>ИТОГО</b>	<b>30</b>		<b>2</b>							<b>2</b>								<b>2</b>									<b>18</b>					<b>64</b>	<b>2</b>		

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)
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>			
<b>очная форма обучения</b>			
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	<p>1. Атомная и молекулярная динамика вещества</p> <p>1.1 Общие представления о динамических свойствах конденсированных сред, корреляционные функции</p> <p>1.2. Колебания кристаллической решетки, фононы, динамическая матрица, собственные частоты и собственные вектора</p> <p>1.2.1 Модели динамики решетки, программа UNISOFT</p> <p>1.3. Молекулярная динамика, виды молекулярных колебаний, внутренние и внешние колебания молекулярных кристаллов</p> <p>1.4 Диффузионные процессы в конденсированных средах</p>	лекции	7
2	<p>2. Исследование динамических характеристик конденсированных сред методами рассеяния нейтронов и синхротронного излучения</p> <p>2.1. Когерентное неупругое рассеяние нейтронов, фононные дисперсионные кривые, динамические функции парного распределения</p> <p>2.2. Некогерентное неупругое рассеяние нейтронов, функция плотности фононных состояний, метод изотопического контраста</p> <p>2.3. Квазиупругое рассеяние нейтронов, релаксационные и диффузионные процессы</p>	лекции	7
3	<p>3. Исследование динамических характеристик конденсированных сред методами синхротронного излучения</p> <p>3.1. Неупругое рассеяние СИ</p> <p>3.1.1 Сходства и различия методов неупругого рассеяния нейтронов и СИ</p> <p>3.2. Использование когерентного СИ, метод рентгеновской фотонной корреляционной спектроскопии</p>	лекции	8
4	<p>4. Экспериментальные методы исследования неупругого рассеяния нейтронов и СИ</p> <p>4.1. Трехосный нейтронный спектрометр; функция разрешения, эффекты фокусировки</p> <p>4.1.1 Спектрометр обратного рассеяния</p> <p>4.2. Времяпролетные спектрометры; спектрометры прямой и обратной геометрии, многодетекторные спектрометры</p> <p>4.2. Метод нейтронного спинового эха; спин-эхо спектрометры.</p> <p>4.2. Спектрометр неупругого рассеяния СИ</p>	лекции	8
5	Исследование динамики решетки металлов, электрон-фононное взаимодействие, эффект Кона	Самостоятельная работа в	3

	Примеры.	присутствии преподавателя	
6	Сильно коррелированные электронные системы. Примеры.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
7	Динамика решетки и фазовые переходы. Критическая динамика, мягкая мода и центральный пик, переходы в несоразмерную фазу амплитудоны и фазоны. Примеры.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	4
8	Наноструктурированные материалы, поверхностные колебания, Примеры	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
9	Диффузия жидкостей в нанопорах и наноканалах, продольная и поперечная диффузия, квазиупругое рассеяние нейтронов, Примеры	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
10	Анализ работы трехосного нейтронного спектрометра с использованием «виртуального трехосного спектрометра» vTAS	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	4
11	Расчет параметров нейтронных спектрометров с использованием программного комплекса McStas.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
12	Расчет разрешения трехосного нейтронного спектрометра в гауссовом и негауссовом приближениях и обработка экспериментальных данных.	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	3
13	Анализ спектров неупругого рассеяния нейтронов, получаемых на многодетекторных времяпролетных спектрометрах с использованием программного комплекса DAVE	Самостоятельная работа в присутствии преподавателя	4

### 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:

- перечнем заданий для самостоятельной работы;
- методическими указаниями для использования программных продуктов Reslib, McStas, Unisoft, vTAS, Dave и MFit. при выполнении заданий.

### 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.

Методика оценки и система соответствия баллов:

	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	Превосходно
Балльная система (100 баллов максимум)	< 30    31-49	50-59    60-70	71-80	81-90	91-100
Балльная система (5 баллов максимум)	2	3	4	5	5 с отличием

### 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. Виды динамических процессов в конденсированных средах.
2. Трехосный нейтронный спектрометр, методы сканирования фазового пространства

Билет 2.

3. Динамика кристаллической решетки в гармоническом приближении, динамическая матрица, собственные частоты и собственные вектора колебаний.
4. Метод нейтронного спинового эха

Билет 3.

5. Ангармонизм тепловых колебаний, затухание фононов.
6. Спектрометры неупругого рассеяния на импульсных источниках.

Билет 4.

7. Структурные фазовые переходы и динамика решетки, Мягкие моды и центральный пик.
8. Спектрометры неупругого рассеяния СИ

Билет 5.

9. Функция плотности колебательных состояний, Особенности Ван-Хова
10. Сравнение методов неупругого рассеяния нейтронов и СИ

Билет 6.

11. Диффузионные процессы, виды диффузии, диффузия в нанопорах и наноканалах
12. Спин-эхо спектрометры и применение техники спинового эха в трехосном спектрометре

Билет 7.

13. Неупругое когерентное рассеяние на фононах в кристаллах, обобщенная динамическая восприимчивость и неупругий структурный фактор
14. Рассеяние когерентного СИ и метод рентгеновской фотонной корреляционной спектроскопии

Билет 8.

15. Принципы теоретико-группового анализа колебаний кристаллической решетки. Правила отбора в экспериментах по неупругому когерентному рассеянию нейтронов.
16. Анализ спектров многодетекторных времяпролетных спектрометров, динамическая функция парного распределения

Билет 9.

17. Неупругое некогерентное рассеяние нейтронов, некогерентное приближение для поликристаллических образцов
18. Феноменологические модели динамики решетки и использование программы UNISOFT для планирования эксперимента.

Билет 10.

19. Динамический структурный анализ, определение собственных векторов колебаний
20. Использование квазиупругого рассеяния нейтронов, для изучения процессов диффузии.

3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

**Анкета-отзыв** на дисциплину «Атомная и молекулярная динамика: неупругое рассеяние нейтронов и синхротронного излучения»

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, интерактивная доска 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, Excel, 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. Компьютерный класс должны быть обеспечен комплектом программного обеспечения Reslib, McStas, Unisoft, vTAS, Dave и MFit.

### 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. Мигдал А., Взаимодействие нейтронов с электронными оболочками, 2012, 46с.
2. А.А. Босак и др., Неупругое рассеяние синхротронного излучения. СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2010 .— 161 с
3. Фетисов Г. В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. — М.: Физматлит, 2007. — 672 с.
4. И.И.Гуревич, Л.В.Тарасов. Физика нейтронов низких энергий. "Наука", М. 1965.
5. Ю.А.Изюмов, Н.А.Черноплёков. Нейтронная спектроскопия. М.: Энергоиздат 1983
6. В.Л. Аксенов, Н.М. Плакида, С. Стаменкович, Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками – М.: Энергоатомиздат 1984

### 3.4.2 Список дополнительной литературы

1. Рейсленд Дж. Физика фононов. М.: Мир, 1976. 365 с
2. Борн, Макс, Хуан, Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностранной лит. 1957. 488с
3. Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат 1980 288с
4. Ю.Б. Кудасов Ближний порядок в сильнокоррелированных ферми-системах УФН, 173(2) с. 121 - 143 (2005)
4. Sunil K Sinha Theory of inelastic x-ray scattering from condensed Matter J. Phys.: Condens. Matter 13 (2001) 7511–7523
5. G. Shirane, Stephen M. Shapiro, John M. Tranquada Neutron Scattering With a Triple-Axis Spectrometer: Basic Techniques Cambridge: Cambridge University press 2004
6. G. Kneller Quasielastic neutron scattering. - <http://dirac.cnrs-orleans.fr/~kneller/HERCULES/hercules2004.pdf>

### 3.4.3 Перечень иных информационных источников

## Раздел 4. Разработчики программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Вахрушев Сергей Борисович	д.ф.-м.н.		профессор	<a href="mailto:s.vakhrushev@mail.ioffe.ru">s.vakhrushev@mail.ioffe.ru</a> тел.: 2927921

