МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

_____ С.Т. Князев

«___» _____ 2016г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ
«Методы структурного анализа твердых веществ»

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Модуль **Методы структурного анализа твердых веществ**	**Код модуля** **1136715**
Образовательная программа **Химия, физика и механика материалов**	**Код ОП** **04.03.02/01.02**
Траектория образовательной программы (ТОП)	
Направление подготовки **Химия, физика и механика материалов**	**Код направления и уровня подготовки:** **04.03.02**
Уровень подготовки **бакалавриат**	
ФГОС ВО	**Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО: 12.03.2015 №221**

Екатеринбург, 2016 г.

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Селезнева Надежда Владимировна	К.ф.-м.н	доцент	Кафедра физики конденси-рованного состояния	

Руководитель модуля *Н.В.Селезнева*

Рекомендовано учебно-методическим советом института естественных наук

Председатель учебно-методического совета *Е.С.Буянова*

Протокол № 49 от 02.06.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

Руководитель образовательной программы (ОП), для которой реализуется модуль

А.Ф.Гусева

СОГЛАСОВАНО
ДИРЕКЦИЯ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ
ПРОГРАММ

1. **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ «**Методы структурного анализа твердых веществ**»**

1.1. Объем модуля, 6 з.е.

1.2. Аннотация содержания модуля

Модуль «Методы структурного анализа твердых веществ**»**

Цели и задачи дисциплины – формирование у студентов фундаментальных представлений о симметрии, атомной структуре, способе их представления и описания, о связи симметрии кристаллов с их свойствами, умение решать задачи с использованием основных законов кристаллографии, теории симметрии и основных кристаллохимических представлений.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать основные законы кристаллографии, особенности симметрии, структуры и свойств кристаллов, способы их описания, основы динамической теории рассеяния рентгеновских лучей.

уметь решать различные задачи с использованием основных законов кристаллографии, теории симметрии и основных кристаллохимических представлений.

владеть приемами и методами решения задач с использованием основных законов кристаллофизики, приемами использования программных средств для проведения структурного анализа материалов различной размерности.

2. **СТРУКТУРА МОДУЛЯ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ ПО ДИСЦИПЛИНАМ**

Наименования дисциплин с указанием, к какой части образовательной программы они относятся: базовой (Б), вариативной – по выбору вуза (ВВ), вариативной - по выбору студента (ВС).		**Семестр изучения**	**Объем времени, отведенный на освоение дисциплин модуля**							
			Аудиторные занятия, час.				**Самостоятельная работа, включая все виды текущей аттестации, час.**	**Промежуточная аттестация (зачет, экзамен), час.**	**Всего по дисциплине**	
			Лекции	**Практические занятия**	**Лабораторные работы**	**Всего**			**Час.**	**Зач. ед.**
1.	**(ВС)** Программные средства структурного анализа	7	34	17		51	39	Э (18)	108	3
2.	**(ВС)** Рентгеновские и нейтронные методы исследования наноматериалов	7	34	17		51	39	Э (18)	108	3
Всего на освоение модуля			**68**	**34**		**102**	**78**	**36**	**216**	**6**

3. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИН В МОДУЛЕ

3.1.	**Пререквизиты и постреквизиты в модуле**	
3.2.	**Кореквизиты**	Программные средства структурного анализа Рентгеновские и нейтронные методы исследования наноматериалов

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ МОДУЛЯ

4.1. Планируемые результаты освоения модуля и составляющие их компетенции

Коды ОП, для которых реализуется модуль	**Планируемые в ОХОП результаты обучения -РО, которые формируются при освоении модуля**	**Компетенции в соответствии с ФГОС ВО, а также дополнительные из ОХОП, формируемые при освоении модуля**
04.03.02/01.02	**РО - 03.** способность применять в рамках научно-исследовательской деятельности знания фундаментальных разделов естественных наук для анализа основных задач, возникающих при выполнении профессиональных функций, и владеть приемами решения таких задач	ОПК-1: способностью использовать современные методы химии, физики, математики, механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание ОПК-5: способностью формулирования задач, связанных с реализацией профессиональных функций, а также использования для их решения методов изученных наук ПК-1: способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы
	РО – 06. способность работать на серийной аппаратуре, применяемой для физико-химических исследований и технологий; выполнять регистрацию, обработку и интерпретацию результатов эксперимента (в рамках научно-исследовательской и производственно-технологической деятельности)	ОПК-3: способностью комплексного использования базовых методов анализа веществ и материалов (включая наноматериалы) и протекающих при их получении и эксплуатации процессов с корректной интерпретацией полученных результатов ОПК-6: способностью использовать современные достижения материаловедения и физическими принципами работы современных технических устройств, используемых при выполнении профессиональных функций ПК-2: готовностью к использованию синтетических и приборно-аналитических навыков, позволяющих работать в различных областях современной технологии, связанных с решением материаловедческих задач ДОПК-3: владению метрологическими методами обработки результатов измерений, стандартизации и сертификации

4.2.Распределение формирования компетенций по дисциплинам модуля

Дисциплины модуля		*ОП*К- 1	*ОПК-3*	*ОП*К -5	*ОПК-6*	*П*К- 1	*ПК-2*	*ДОПК-3*
1	**(ВС)** Программные средства структурного анализа		*	*	*	*		
2	**(ВС)** Рентгеновские и нейтронные методы исследования наноматериалов	*	*	*	*	*	*	*

5. ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО МОДУЛЮ
- не предусмотрена

6. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ МОДУЛЯ

Номер листа изменений	Номер протокола заседания проектной группы модуля	Дата заседания проектной группы модуля	Всего листов в документе	Подпись руководителя проектной группы модуля

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н.Ельцина»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

Перечень сведений о рабочей программе дисциплины	**Учетные данные**
Модуль **Методы структурного анализа твердых веществ**	**Код модуля** **1136715**
Образовательная программа **Химия, физика и механика материалов**	**Код ОП** **04.03.02/01.02**
Направление подготовки **Химия, физика и механика материалов**	**Код направления и уровня подготовки:** **04.03.02**
Уровень подготовки **бакалавриат**	
ФГОС ВО	**Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО**: **12.03.2015 №221**

Екатеринбург, 2016

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Селезнева Надежда Владимировна	кандидат физико-математических наук	доцент	Физики конденсированного состояния	

Руководитель модуля Н.В.Селезнева

Рекомендовано учебно-методическим советом института естественных наук

Председатель учебно-методического совета *Е.С.Буянова*

Протокол № 49 от 02.06.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ «ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА СТРУКТУРНОРГО АНАЛИЗА»

1.1.Аннотация содержания дисциплины

Дисциплина «Программные средства структурного анализа» входит в модуль «Методы структурного анализа твердых веществ». Студенты осваивают кристаллографию и методы расчета теоретических дифрактограмм для различных типов структур и условий эксперимента. В рамках данного курса, студент учиться интуитивно генерировать начальные структурные модели для их последующего использования в процедурах уточнения. Основное внимание уделено обработке дифракционных данных с помощью полнопрофильного анализа Ритвельда.

1.2. Язык реализации программы – русский язык

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Результатом обучения в рамках дисциплины является формирование у студента следующих компетенций:

ОПК-3 - способностью комплексного использования базовых методов анализа веществ и материалов (включая наноматериалы) и протекающих при их получении и эксплуатации процессов с корректной интерпретацией полученных результатов;

ОПК-5 - способностью формулирования задач, связанных с реализацией профессиональных функций, а также использования для их решения методов изученных наук;

ОПК-6 - способностью использовать современные достижения материаловедения и физическими принципами работы современных технических устройств, используемых при выполнении профессиональных функций;

ПК-1 - способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы.

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать: основные законы кристаллографии, особенности симметрии, структуры и свойств кристаллов, способы их описания, основы динамической теории рассеяния рентгеновских лучей; практические основы компьютерной обработки экспериментальных данных, прикладные программы для математических вычислений и визуализации результатов измерений.

Уметь: решать различные задачи с использованием основных законов кристаллографии, теории симметрии и основных кристаллохимических представлений; графически представлять любые экспериментальные данные, аппроксимировать данные подходящей функцией на основе выбора нужного физического закона, выбирать максимально точные параметры аппроксимации, проводить обработку дифракционных данных с помощью программного обеспечения.

Владеть навыками в проведении эксперимента согласно поставленным целям и решаемым задачам; корректно провести фазовый анализ; провести качественный рентгеноструктурный анализ с соблюдением всех этапов (определить, пространственную группу, уточнить координаты атомов, тепловые добавки, коэффициенты заполнения и т.д.); определить размеры кристаллитов и микронапряжений, овладеть общими приёмами решения прикладных задач с использованием компьютерных программ.

1.4. Объем дисциплины

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)*	7
1.	**Аудиторные занятия**	**51**	**51**	**51**
2.	Лекции	34	34	34
3.	Практические занятия	17	17	17
4.	Лабораторные работы			
5.	**Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации**	**39**	**7.65**	**39**
6.	**Промежуточная аттестация**	**18**	**2.33**	**Э (18)**
7.	**Общий объем по учебному плану, час.**	**108**	**60.98**	**108**
8.	**Общий объем по учебному плану, з.е.**	**3**		**3**

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины	Содержание
1	Основы дифракционных методов исследования.	Предмет и методы рентгеноструктурного анализа. Применение рентгеновских лучей. Основные свойства рентгеновских лучей. Элементарный акт рассеяния. Когерентное рассеяние на свободных электронах (классическая теория). Некогерентное рассеяние на свободных электронах (квантовая теория). Рассеяние на элементарной ячейке. Общие положения. Структурный фактор элементарной ячейки кристалла. Формулы структурных факторов для различных пространственных групп. Изменение фазы при рассеянии и его влияние на структурный множитель. Рассеяние на кристалле. Интерференционная функция Лауэ. Интегральная интенсивность. Парадоксы теории. Первичная экстинкция. Идеальный кристалл. Особенности проведения эксперимента по дифракции рентгеновских лучей на объектах с малыми размерами кристаллитов.
2	Применение рентгеноструктурного анализа для исследования материалов.	Определение плотности и молекулярного веса. Определение типа твердого раствора. Определение коэффициента термического расширения. Определение характеристической температуры Дебая. Фазовый анализ и изучение диаграмм состояний. Исследование границ растворимости. Фазовый анализ (качественный и количественный фазовый анализ). Рентгенографическое определение внутренних

		напряжений в материалах (исследование макро- и микронапряжений). Рентгенографическое определение величины кристаллитов. Определение преимущественной ориентации зерен (текстура).
3	Метод полнопрофильного анализа (метод Ритвельда).	Математическое описание метода. Определение размеров кристаллитов и микронапряжений в материалах с помощью программы «FullProf».
4	Программа PowderCell	Характеристики и возможности программы. Компьютерное моделирование структур и дифракционных картин рассеяния рентгеновских лучей в «Powder Cell». Уточнение структурных параметров реальных объектов в «Powder Cell»
5	Программа FullProf	Программный пакет FullProf как один из методов обработки дифракционных данных с помощью полнопрофильного анализа Ритвельда.

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

3.1. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины

Объем модуля (зач.ед.):6
Объем дисциплины (зач.ед.):3

Раздел дисциплины			Аудиторные занятия (час.)				Самостоятельная работа: виды, количество и объемы мероприятий																							
Код раздела, темы	Наименование раздела, темы	**Всего по разделу, теме (час.)**	**Всего аудиторной работы (час.)**	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	**Всего самостоятельной работы студентов (час.)**	Подготовка к аудиторным занятиям (час.)					Выполнение самостоятельных внеаудиторных работ (колич.)											Подготовка к контрольным мероприятиям текущей аттестации (колич.)			Подготовка к промежуточной аттестации по дисциплине (час.)		Подготовка в рамках дисциплины к промежуточной аттестации по модулю (час.)	
								Всего (час.)	Лекция	Практ., семинар. занятие	Лабораторное занятие	Н/и семинар, семинар-конфер., коллоквиум (магистратура)	**Всего (час.)**	Домашняя работа*	Графическая работа*	Реферат, эссе, творч. работа*	Проектная работа*	Расчетная работа, разработка программного продукта*	Расчетно-графическая работа*	Домашняя работа на иностр. языке*	Перевод иноя. литературы*	Курсовая работа*	Курсовой проект*	**Всего (час.)**	Контрольная работа*	Коллоквиум*	Зачет	Экзамен	Интегрированный экзамен по модулю	Проект по модулю
1	*Раздел I. Основы дифракционных методов исследования.*	**14**	**12**	12	0	0	**2**	**0**	2	0									0					0,0						
2	*Раздел II. Применение рентгеноструктурного анализа для исследования материалов.*	**18**	**16**	10	6	0	**2**	**2**	0	2									0					0,0						
3	*Раздел III. Метод полнопрофильного анализа (метод Ритвельда).*	**4**	**4**	4	0	0	**0**	**0**	0	0									0					0,0						
4	*Раздел IV Программа PowerCell.*	**17**	**5**	2	3	0	**12**	**2**	0	2			**10**						10											
5	*Раздел V. Программа FullProf.*	**37**	**14**	6	8	0	**23**	**3**	0	3			**20**		0				20											
	Всего (час), без учета промежуточной аттестации**:**	**90**	**51**	**34**	**17**	**0**	**39**	**9**	**2**	**7**	**0**	**0**	**30**	**0**	**0**	**0**	**0**		**30**	**0**	**0**	**0**	**0**	**0,0**	**0**	**0**				
	Всего по дисциплине (час.):	**108**	**51**				**57**	В т.ч. промежуточная аттестация																			0	**18**	**0**	0

4. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1. Лабораторные работы - *не предусмотрено*

4.2. Практические занятия

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
Раздел II.	1	Экспериментальная база данных для полной расшифровки. Маршруты определения атомной структуры кристалла. Проведение качественного рентгенофазового анализа. Проведение количественного фазового анализа методом подмешивания эталонного вещества. Количественный фазовый анализ материалов со смешанной аморфно-кристаллической структурой.	6
Раздел IV.	2	Смоделировать дифракционные картины рассеяния рентгеновских лучей от ГЦК, ОЦК решеток.	3
Раздел V.	3	Составить файл ввода данных с расширением *.pcr для предложенного двухфазного образца. Уточнить профили без точного знания структуры, с использованием данных по стартовым ячейкам.	2
Раздел V.	4	Уточнить кристаллическую структуру соединения $LaMnO_3$ ниже и выше перехода Ян-Теллера.	2
Раздел V.	5	Составить файл ввода данных с расширением *.pcr с использованием данных нейтронного излучения для магнитного поликристаллического образца, снятого при комнатной температуре и образца, снятого при температуре ниже магнитного перехода. Найти характер магнитного упорядочения и значения магнитных моментов.	4
		Всего:	17

4.3.Примерная тематика самостоятельной работы

4.3.1. Примерный перечень тем домашних работ

- *не предусмотрено*

4.3.2. Примерный перечень тем графических работ

– *не предусмотрено*

4.3.3. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)

- *не предусмотрено*

4.3.4 Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов

- *не предусмотрено*

4.3.5. Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)

- *не предусмотрено*

4.3.6. Примерный перечень тем расчетно-графических работ

1. Смоделировать дифракционные картины рассеяния рентгеновских лучей.

2. Провести суперпозицию дифракционных картин для смеси двух кристаллических фаз разных концентраций.
3. Сгенерировать возможные структурные упорядочения для предложенной преподавателем пространственной группы, построить их теоретические рентгенограммы.
4. Экспортировать кристаллическую структуру и расчетную дифрактограмму в графический формат POVRay (получить объемную кристаллическую структуру)
5. Составить файл ввода данных с расширением *.pcr для предложенного поликристаллического образца с известной структурой. Методом подбора определить одну из весовых схем (метод наименьших квадратов, максимального подобия или единичных весов). Уточнить нулевой сдвиг, шкальный фактор и параметры элементарной ячейки. Варьируя профильные и фоновые функции добиться наилучшей сходимости результатов подгонки. Сделать выводы. Уточнить координаты атомов, тепловые добавки, коэффициенты заполнения и сделать выводы о корректности предложенной преподавателем модели.
6. Рассчитать значения структурного фактора для различных пространственных групп.
7. Изменяя длину волны от максимальной (Cr) до минимальной (Ag) рентгеновского излучения, проследить за изменением дифрактограммы. Дать объяснение увеличению дифракционных линий при уменьшении длины волны рентгеновского излучения.
8. Проследить за изменением дифрактограммы с понижением класса симметрии для сплава Cu-Au (25%Au). В неупорядоченном состоянии при повышенных температурах сплав характеризуется статистическим распределением Au и Cu по узлам ГЦК решетки с параметром э.я.a=3.75 Å. Факторы занятости позиции для Au - 0.25, Cu - 0.75 соответственно, координаты атома Au в э.я. – (0 0 0), Cu- (0 0.5 0.5), (0.5 0 0.5) и (0.5 0.5 0, пр.гр. 225. При отжиге происходит упорядочение с понижением симметрии, ячейка становится примитивной кубической (Pm3m), координаты атомов: Au – (0 0 0), Cu – (0 0.5 0.5), (0.5 0 0.5), (0.5 0.5 0).
9. Рассчитать теоретические дифрактограммы для Mo и Cu - излучений. Проверить правила погасания: 1. Для кубической P- решетки разрешены все рефлексы hkl. 2. Для ОЦК I- решетки разрешены только рефлексы, для которых сумма индексов - четное число. 3. Для ГЦК F- решетки разрешены только рефлексы одинаковой четности. 4. Для структурного типа алмаза разрешены только рефлексы одинаковой четности, сумма которых делится на 4. 5. Для структурного типа CsCl, если сумма индексов - четное число, то интенсивность пропорциональна квадрату суммы амплитуд рассеяния атомов, если - нечетное число, то интенсивность пропорциональна квадрату разности атомных амплитуд. Поэтому если структура образована атомами с близкими атомными номерами, то картина дифракции мало отличается от рентгенограммы для ОЦК структуры.

4.3.7. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ)

- не предусмотрено

4.3.8. Примерная тематика контрольных работ

- не предусмотрено

4.3.9. Примерная тематика коллоквиумов

- не предусмотрено

5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ, ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела, темы дисциплины	Активные методы обучения						Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение					
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
1 *Раздел I.*				*	*							
2 *Раздел II.*				*	*							
3 *Раздел III..*				*	*							
4 *Раздел IV.*				*	*							
5 *Раздел V.*				*	*							

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ (Приложение 1)

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

9.1.1.Основная литература

1. Горбунов В.А., Селезнева Н. В., Надольский А. Л. Учебно-методический комплекс дисциплины "Рентгеновские методы исследования наноструктур" [Электронный ресурс]. Федер. агентство по образованию, Урал. гос. ун-т им. А. М. Горького, ИОНЦ "Нанотехнологии и перспективные материалы"— Екатеринбург, 2008. Постоянная ссылка: http://elar.usu.ru/handle/1234.56789/1547
2. Филонова Е.А., Пирогов А.Н., Элементы структурного анализа. Метод Fullprof как один из методов обработки дифракционных данных. Методические указания для студентов химического факультета, Екатеринбург, 2005.

9.1.2.Дополнительная литература

1. Рентгеновский фазовый анализ [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие. — Электрон. дан. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана (Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана), 2009. — 16 с.

2. Диденко, И.С. Кристаллофизика. Симметрия кристаллических многогранников. Лабораторный практикум [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.С. Диденко, В.В. Гераськин. — Электрон. дан. — М. : МИСИС, 2011. — 76 с.

9.2.Методические разработки

не используются

9.3.Программное обеспечение

- Сайт программы полнопрофильного анализа FullProf http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/fullprof/index.html; http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/fullprof/

9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов Института экспериментальной минералогии РАН http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php
- Минералогическая база Franklin Minerals http://franklin-sterlinghill.com/
- Веб-сайт международного союза кристаллографов http://www.iucr.org/
- список пространственных групп http://www.highpressurescience.com/onlinetools/spacegroups.html.
- **COD (Crystallography Open Database) -** база данных кристаллических структур органических, неорганических, металло-органических соединений и минералов, за исключением биополимеров.http://www.crystallography.net/

9.5.Электронные образовательные ресурсы

1. Анищик, В.М. Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.М. Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. — Электрон. дан. — Минск : "Вышэйшая школа", 2011. — 216 с.
2. Белов, Н.П. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.П. Белов, О.К. Покопцева, А.Д. Яськов. — Электрон. дан. — Спб.: НИУ ИТМО (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), 2009. — 46 с.
3. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ [Электронный ресурс]: учебное пособие. — Электрон. дан. — М: Физматлит, 2007. — 672 с.
4. Розин, К.М. Кристаллофизика. Учебное пособие [Электронный ресурс]: учебное пособие / К.М. Розин, В.С. Петраков. — Электрон. дан. — М.: МИСИС, 2006. — 248 с.
5. Николаев, А.А. Кристаллофизика минералов. Практикум [Электронный ресурс]: учебное пособие. — Электрон. дан. — М: МИСИС, 2009. — 45 с.
6. Никитенко, Ю.В. Рефлектометрия поляризованных нейтронов [Электронный ресурс]: / Ю.В. Никитенко, В.Г. Сыромятников. — Электрон. дан. — М.: Физматлит, 2013. — 217 с.
7. Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения [Электронный ресурс]:. — Электрон. дан. — М.: Физматлит, 2007. — 240 с.
8. Сонин, А.С. Курс макроскопической кристаллофизики [Электронный ресурс]:. — Электрон. дан. — М.: Физматлит, 2006. — 256 с.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащенности дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Мультимедийная аудитория:12 столов на 24 посадочных мест, стол и стул для преподавателя, доска, Проектор Sanyo PLC– xu70 (SVGA.1500 ansi), ноутбук HP ts640. Компьютерные демонстрации, презентации для сопровождения лекций. Съемка профилей линий производится в дискретном режиме (съемка “по точкам”) на дифрактометре Bruker Advance D8. Обработка результатов производится в соответствии с описанием программы FullProf.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1
к рабочей программе дисциплины

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины –

6.2.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**
1. Актуализация знаний по материалам предыдущих лекций	7, 1-17	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.6		
Промежуточная аттестация по лекциям – *экзамен* **Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.4**		
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**
1. Актуализация знаний по материалам предыдущего практического занятия	7, 1-17	51
2. Выполнение заданий практического занятия	7, 1-17	49
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– 0**		

6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта - не предусмотрено

6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины

Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина	**Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре**
Семестр 7	**1**

ПРИЛОЖЕНИЕ 2
к рабочей программе дисциплины

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО http://fepo.i-exam.ru.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры http://training.i-exam.ru.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3
к рабочей программе дисциплины

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	**Признаки уровня освоения компонентов компетенций**		
	пороговый	**повышенный**	**высокий**
Знания	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
Умения	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
Личностные качества	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

НТК не проводится.

8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий

не предусмотрено

8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий

не предусмотрено

8.3.3. Примерные контрольные кейсы

не предусмотрено

8.3.4. Перечень примерных вопросов для зачета

не предусмотрено

8.3.5. Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Рассеяние рентгеновских лучей, области применения.
2. Какие характеристики необходимы для расчета теоретических дифрактограмм? Как рассчитать теоретическую дифрактограмму поликристалла?
3. Правила погасания дифракционных рефлексов. Индицирование дифрактограммы кубического кристалла.
4. Вывод интерференционного уравнения Лауэ
5. Факторы интенсивности дифрагированных лучей.
6. Вывод зависимости полуширины линии от мелкодисперсности (формула Шеррера-Селякова) и относительной деформации
7. Влияние размеров кристаллитов на ширину дифракционных максимумов.
8. Особенности дифракционных методов исследования мелкодисперсных объектов.
9. Определение формы и размеров кристаллитов методом Фурье анализа.
10. Общая характеристика программы FullProf. Ее характерные особенности.
11. Метод полнопрофильного анализа.
12. Описание форм и ширины пика в методе Ритвельда.
13. Метод вычисления, факторы сходимости.
14. Связь между интегральными полуширинами дифракционных максимумов нанокристаллического образца и эталона.
15. Определение величины мелкодисперсности нанокристаллитов методом полнопрофильного анализа.
16. Определение величины микронапряжений нанокристаллитов методом полнопрофильного анализа.

8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО http://fepo.i-exam.ru.

8.3.8. Интернет-тренажеры

Не используются

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н.Ельцина»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

РЕНТГЕНОВСКИЕ И НЕЙТРОННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Перечень сведений о рабочей программе дисциплины	**Учетные данные**
Модуль **Методы структурного анализа твердых веществ**	**Код модуля** **1136715**
Образовательная программа **Химия, физика и механика материалов**	**Код ОП** **04.03.02/01.02**
Направление подготовки **Химия, физика и механика материалов**	**Код направления и уровня подготовки:** **04.03.02**
Уровень подготовки **бакалавриат**	
ФГОС ВО	**Реквизиты приказа Минобрнауки РФ об утверждении ФГОС ВО**: **12.03.2015 № 221**

Екатеринбург, 2016

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Селезнева Надежда Владимировна	кандидат физико-математических наук	доцент	Физики конденсированного состояния	

Руководитель модуля Н.В. Селезнева

Рекомендовано учебно-методическим советом института естественных наук

Председатель учебно-методического совета *Е.С.Буянова*

Протокол № 49 от 02.06.2016 г.

Согласовано:

Дирекция образовательных программ

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ «РЕНТГЕНОВСКИЕ И НЕЙТРОННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ»

1.1. Аннотация содержания дисциплины

Дисциплина «Рентгеновские и нейтронные исследования наноматериалов» входит в модуль «Методы структурного анализа твердых веществ». Целью дисциплины является формирование представлений о физике, технике и возможностях методов рентгеновской и нейтронной дифракции, практических навыков работы с рентгеновской аппаратурой и обработки полученных экспериментальных спектров. Основные задачи курса – научить студентов использовать дифракционные методы для уточнения кристаллических и магнитных структур соединений. Особое внимание уделено интерпретации дифракционных данных, а именно математическим аспектам метода полнопрофильного анализа. В результате освоения дисциплины студент приобретет навыки правильного выбора методов исследования наноструктур и различных нанообъектов, а также овладеет общими приёмами решения прикладных задач с использованием компьютерных программ.

1.2. Язык реализации программы – русский язык

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Результатом обучения в рамках дисциплины является формирование у студента следующих компетенций:

ОПК-1 - способностью использовать современные методы химии, физики, математики, механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание;

ОПК-3 - способностью комплексного использования базовых методов анализа веществ и материалов (включая наноматериалы) и протекающих при их получении и эксплуатации процессов с корректной интерпретацией полученных результатов;

ОПК-5 - способностью формулирования задач, связанных с реализацией профессиональных функций, а также использования для их решения методов изученных наук;

ОПК-6 - способностью использовать современные достижения материаловедения и физическими принципами работы современных технических устройств, используемых при выполнении профессиональных функций;

ПК-1 - способностью использовать основные современные методологические, теоретические и экспериментальные подходы к проведению научных исследований по выбранному профилю программы;

ПК-2 – готовностью к использованию синтетических и приборно-аналитических навыков, позволяющих работать в различных областях современной технологии, связанных с решением материаловедческих задач;

ДОПК-3 - владению метрологическими методами обработки результатов измерений, стандартизации и сертификации.

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать: возможности дифракционных методов для исследования материалов.

Уметь использовать дифракционные методы для исследования наноматериалов, получать информацию о размере кристаллитов, о распределении зерен по размерам, о толщине и количестве слоев в многослойных нанообъектах, проводить аттестацию монокристаллов.

Владеть навыками правильного выбора методов исследования структуры различных материалов и владеть общими приёмами решения прикладных задач с использованием

компьютерных программ. Демонстрировать навыки и опыт деятельности в использовании дифракционных методах анализа материалов.

1.4. Объем дисциплины

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	7
1.	**Аудиторные занятия**	**51**	**51**	**51**
2.	Лекции	34	34	34
3.	Практические занятия	17	17	17
4.	Лабораторные работы			
5.	**Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей аттестации**	**39**	**7.65**	**39**
6.	**Промежуточная аттестация**	**18**	**2.33**	**Э (18)**
7.	**Общий объем по учебному плану, час.**	**108**	**60.98**	**108**
8.	**Общий объем по учебному плану, з.е.**	**3**		**3**

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины	Содержание
1	Дифракционные методы исследования наноматериалов.	Общие положения. Структурный фактор элементарной ячейки кристалла. Рассеяние на кристалле. Интерференционная функция Лауэ. Особенности проведения эксперимента по дифракции рентгеновских лучей на объектах с малыми областей когерентного рассеяния.
2	Синхротронное излучение.	Физические принципы генерации СИ. Динамика электрона в накопительном кольце. Радиационные потери. Количественные характеристики излучения поворотного магнита. Общая схема и ключевые параметры синхротронного источника. Применения СИ.
3	Нейтронографические методы исследования материалов.	Свойства нейтронов и их взаимодействие с веществом. Ядерное рассеяние нейтронов. Магнитное рассеяние нейтронов. Экспериментальная техника (нейтронные дифрактометры). Нейтронная дифрактометрия. Магнитная нейтронография. Дифракция нейтронов и наноструктуры.
4	Метод полнопрофильного анализа. Уточнение магнитной структуры с помощью программы	Математическое описание метода. Определение размеров кристаллитов и микронапряжений в материалах с помощью программы «FullProf». Программный пакет FullProf как один из методов

	FullProf.	обработки дифракционных данных с помощью полнопрофильного анализа Ритвельда. Уточнение магнитной структуры с помощью программы FullProf.

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

3.1. Распределение аудиторной нагрузки и мероприятий самостоятельной работы по разделам дисциплины

Объем модуля (зач.ед.):6
Объем дисциплины (зач.ед.):3

Раздел дисциплины			Аудиторные занятия (час.)				Самостоятельная работа: виды, количество и объемы мероприятий																					
Код раздела, темы	Наименование раздела, темы	**Всего по разделу, теме (час.)**	**Всего аудиторной работы (час.)**	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	**Всего самостоятельной работы студентов (час.)**	Подготовка к аудиторным занятиям (час.)					Выполнение самостоятельных внеаудиторных работ (колич.)										Подготовка к контрольным мероприятиям текущей аттестации (колич.)			Подготовка к промежуточной аттестации по дисциплине (час.)		Подготовка в рамках дисциплины к промежуточной аттестации по модулю (час.)	
								Всего (час.)	Лекция	Практ., семинар. занятие	Лабораторное занятие	Н/и семинар, семинар-конфер., коллоквиум (магистратура)	**Всего (час.)**	Домашняя работа*	Графическая работа*	Реферат, эссе, творч. работа*	Проектная работа*	Расчетная работа, разработка программного продукта*	Расчетно-графическая работа*	Домашняя работа на иностр. языке*	Перевод иностр. литературы*	Курсовая работа*	Курсовой проект*	**Всего (час.)**	Контрольная работа*	Коллоквиум*	Зачет	Экзамен	Интегрированный экзамен по модулю	Проект по модулю
1	*Раздел I. Дифракционные методы исследования наноматериалов.*	**14**	**8**	8	0	0	**6**	**6**	6	0									0				0,0						
2	*Раздел II Синхротронное излучение.*	**12**	**6**	6	0	0	**6**	**6**	6	0									0				0,0						
3	*Раздел III. Нейтронографические методы исследования материалов.*	**15**	**10**	10	0	0	**5**	**0**	3	0			**2**						2				0,0						
4	*Раздел IV Метод полнопрофильного анализа. Уточнение магнитной структуры с помощью программы FullProf.*	**49**	**27**	10	17	0	**22**	**0**	2	0			**20**						20										
	Всего (час), без учета промежуточной аттестации:	**90**	**51**	**34**	**17**	**0**	**39**	**12**	**17**	**0**	**0**	**0**	**22**	**0**	**0**	**0**	**0**		**22**	**0**	**0**	**0**	**0**	**0,0**	**0**	**0**				
	Всего по дисциплине (час.):	**108**	**51**				**57**	В т.ч. промежуточная аттестация																			**0**	**18**	**0**	**0**

4. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1. Лабораторные работы - *не предусмотрено*

4.2. Практические занятия

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
Раздел IV.	1	Расчет интенсивности ядерного и магнитного рефлекса вручную и с помощью программы Fullprof.	2
Раздел IV.	2	Уточнить профили дифракционных картин без точного знания структуры, с использованием данных по стартовым ячейкам. Составить файл ввода данных с расширением *.pcr для предложенного двухфазного образца.	2
Раздел IV.	3	Уточнить ядерную структуру образца, используя данные нейтронографического эксперимента	2
Раздел IV.	4	Определение размеров кристаллитов и микронапряжений в наноматериалах.	2
Раздел IV.	5	Уточнить магнитную структуру образца с волновым вектором k=0 с помощью программы Fullprof.	3
Раздел IV.	6	Составить файл ввода данных с расширением *.pcr с использованием данных нейтронного излучения для магнитного поликристаллического образца, снятого при комнатной температуре и образца, снятого при температуре ниже магнитного перехода. Найти характер магнитного упорядочения и значения магнитных моментов. Уточнить магнитную структуру образца с помощью программы Fullprof.	4
Раздел IV.	7	Уточнить магнитную структуру образца с несоизмеримым волновым вектором с помощью программы Fullprof.	2
		Всего:	17

4.3.Примерная тематика самостоятельной работы

4.3.1. Примерный перечень тем домашних работ - *не предусмотрено*

4.3.2. Примерный перечень тем графических работ – *не предусмотрено*

4.3.3. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ) - *не предусмотрено*

4.3.4 Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов - *не предусмотрено*

4.3.5.Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов) - *не предусмотрено*

4.3.6. Примерный перечень тем расчетно-графических работ

1. Сгенерировать возможные структурные упорядочения для предложенной преподавателем пространственной группы, построить их теоретические рентгенограммы.
2. Составить файл ввода данных с расширением *.pcr для предложенного поликристаллического образца с известной структурой. Методом подбора определить одну из весовых схем (метод наименьших квадратов, максимального подобия или единичных весов). Уточнить нулевой сдвиг, шкальный фактор и параметры элементарной ячейки. Варьируя профильные и фоновые функции добиться наилучшей сходимости результатов подгонки. Сделать выводы. Уточнить координаты атомов, тепловые добавки, коэффициенты заполнения и сделать выводы о корректности предложенной преподавателем модели.
3. Рассчитать значения структурного фактора для различных пространственных групп.
4. Уточнить кристаллическую структуру соединения $LaMnO_3$ ниже и выше перехода Ян-Теллера. Структура $LaMnO_3$ ромбическая (Пр.группа Pbnm) с параметрами ячейки при комнатной температуре: a= 5.53 Å, b = 5.75 Å, c = 7,69 Å. Позиции атомов:
   La -0.01 0.05 0.25 (4c)
   Mn 0.50 0.00 0.00 (4a)
   O1 0.00 0.49 0.25 (4c)
   O2 0.73 0.31 0.04 (8d) Длина волны λ= 1.2272 Å, используются данные порошковой нейтронографии INSTR=6 Экспериментальные файлы: La300k.dat T= RT, La573k.dat T= 573 K, La798k.dat T= 798 K. Уточнить три дифракционные картины, начиная с комнатной температуры. Определить температурное изменение длин связей и углов, используя опцию JDI = 3 для расчета длин связей.
5. Начальная структура соединения Pd_3Mn кубическая (Пр.группа P m -3 m, a = 3.9 Å), позиции атомов: Mn (1a) : (0, 0 , 0); Pd (3c) : (0,1/2,1/2) Длина волны λ= 1.2259 Å. Используются данные порошковой нейтронографии INSTR=1Экспериментальный файл: pd3mnd.dat. Введение дейтерия (D) в матрицу Pd_3Mn индуцирует серию дефектов, которые приводят к образованию антифазных доменов, аналогичных сплавам Cu3Au-типа. При этом все отражения от различных (hkl)-четные и уширены за счет размерных эффектов.Начните уточнение функции инструментального уширения разрешения дифрактометра используя идеальную структуру Pd_3Mn. Введите JFOU=4 для вывода файлов для Фурье синтеза. Используя программу GFourier получите позиции D. Микроструктурные параметры могут быть найдены после определения позиции D.Уточните структуру на основе положения атомов D и уточните фактор заселенности D, чтобы определить состав. Для лучшего уточнения микроструктурных параметров используйте модель "-14.

4.3.7. Примерный перечень тем курсовых проектов (курсовых работ) *не предусмотрено*

4.3.8. Примерная тематика контрольных работ *не предусмотрено*

4.3.9. Примерная тематика коллоквиумов *не предусмотрено*

5. СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ, ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела, темы дисциплины	Активные методы обучения						Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение					
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
1 *Раздел I.*				*	*							
2 *Раздел II.*				*	*							
3 *Раздел III.*.				*	*							
4 *Раздел IV*.				*	*							

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ (Приложение 1)

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ (Приложение 2)

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (Приложение 3)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

9.1.1.Основная литература

1. Горбунов В.А., Селезнева Н.В., Надольский А.Л. Учебно-методический комплекс дисциплины "Рентгеновские методы исследования наноструктур" [Электронный ресурс]. Федер. агентство по образованию, Урал. гос. ун-т им. А. М. Горького, ИОНЦ "Нанотехнологии и перспективные материалы"— Екатеринбург, 2008. Постоянная ссылка: http://elar.usu.ru/handle/1234.56789/1547
2. Филонова Е.А., Пирогов А.Н., Элементы структурного анализа. Метод Fullprof как один из методов обработки дифракционных данных. Методические указания для студентов химического факультета, Екатеринбург, 2005.

9.1.2.Дополнительная литература

1. Диденко, И.С. Кристаллофизика. Симметрия кристаллических многогранников. Лабораторный практикум [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.С. Диденко, В.В. Гераськин. — Электрон. дан. — М. : МИСИС, 2011. — 76 с.
2. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Структурная нейтронография. Том 1. М.:Атомиздат. 1979. 343 с.
3. Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. Том 2. М.: Атомиздат. 1981. 311 с.

9.2.Методические разработки

не используются

9.3.Программное обеспечение

- Сайт программы полнопрофильного анализа FullProf http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/fullprof/index.html; http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/fullprof/

9.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов Института экспериментальной минералогии РАН http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php
- Минералогическая база Franklin Minerals http://franklin-sterlinghill.com/
- Веб-сайт международного союза кристаллографов http://www.iucr.org/
- список пространственных групп http://www.highpressurescience.com/onlinetools/spacegroups.html.
- **COD (Crystallography Open Database) -** база данных кристаллических структур органических, неорганических, металло-органических соединений и минералов, за исключением биополимеров.http://www.crystallography.net/

9.5.Электронные образовательные ресурсы

1. Анищик, В.М. Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.М. Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. — Электрон. дан. — Минск : "Вышэйшая школа", 2011. — 216 с.
2. Белов, Н.П. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.П. Белов, О.К. Покопцева, А.Д. Яськов. — Электрон. дан. — Спб. : НИУ ИТМО (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), 2009. — 46 с.
3. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 672 с.
4. Розин, К.М. Кристаллофизика. Учебное пособие [Электронный ресурс] : учебное пособие / К.М. Розин, В.С. Петраков. — Электрон. дан. — М. : МИСИС, 2006. — 248 с.
5. Николаев, А.А. Кристаллофизика минералов. Практикум [Электронный ресурс] : учебное пособие. — Электрон. дан. — М. : МИСИС, 2009. — 45 с.
6. Никитенко, Ю.В. Рефлектометрия поляризованных нейтронов [Электронный ресурс] : / Ю.В. Никитенко, В.Г. Сыромятников. — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2013. — 217 с.
7. Павлинский, Г.В. Основы физики рентгеновского излучения [Электронный ресурс] : . — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2007. — 240 с.
8. Сонин, А.С. Курс макроскопической кристаллофизики [Электронный ресурс] : . — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2006. — 256 с.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащенности дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Мультимедийная аудитория:12 столов на 24 посадочных мест, стол и стул для преподавателя, доска, Проектор Sanyo PLC– xu70 (SVGA.1500 ansi), ноутбук HP ts640. Компьютерные демонстрации, презентации для сопровождения лекций. Съемка профилей линий производится в дискретном режиме (съемка “по точкам”) на дифрактометре Bruker Advance D8. Обработка результатов производится в соответствии с описанием программы FullProf.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1
к рабочей программе дисциплины

6. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Весовой коэффициент значимости дисциплины –

6.2.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**
1. Актуализация знаний по материалам предыдущих лекций	7, 1-17	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.6		
Промежуточная аттестация по лекциям – *экзамен* **Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.4**		
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**
1. Актуализация знаний по материалам предыдущего практического занятия	7, 1-17	51
2. Выполнение заданий практического занятия	7, 1-17	49
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– 0**		

6.3. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта – не предусмотрено

6.4. Коэффициент значимости семестровых результатов освоения дисциплины

Порядковый номер семестра по учебному плану, в котором осваивается дисциплина	**Коэффициент значимости результатов освоения дисциплины в семестре**
Семестр 7	**1**

ПРИЛОЖЕНИЕ 2
к рабочей программе дисциплины

7. ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО http://fepo.i-exam.ru.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры http://training.i-exam.ru.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3
к рабочей программе дисциплины

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	**Признаки уровня освоения компонентов компетенций**		
	пороговый	**повышенный**	**высокий**
Знания	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
Умения	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
Личностные качества	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

НТК не проводится

8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий

не предусмотрено

8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий

не предусмотрено

8.3.3. Примерные контрольные кейсы

не предусмотрено

8.3.4. Перечень примерных вопросов для зачета

не предусмотрено

8.3.5. Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Сравнительный анализ рентгенографических и нейтронографических методов исследования.
2. Физические принципы генерации СИ.
3. Основные положения нейтронографии.
4. Влияние размеров кристаллитов на ширину дифракционных максимумов.
5. Особенности дифракционных методов исследования мелкодисперсных объектов.
6. Определение формы и размеров кристаллитов методом Фурье анализа.
7. Метод полнопрофильного анализа.
8. Описание форм и ширины пика в методе Ритвельда.
9. Метод вычисления, факторы сходимости.
10. Структурный фактор для кристаллической и магнитной ячеек.
11. Связь между интегральными полуширинами дифракционных максимумов нанокристаллического образца и эталона.
12. Характеристика программы FullProf.
13. Нейтрон. Классификация нейтронов по энергиям. Применение нейтронов для исследования структурных особенностей материалов.
14. Рассеяние нейтронов. Дифференциальное сечение рассеяния. Дважды дифференциальное сечение рассеяния. Виды магнитное и немагнитное рассеяние.
15. Ядерное рассеяние нейтронов. Плоская и сферическая нейтронные волны.
16. Парная корреляционная функция. Автокорреляционная функция. Природа магнитного рассеяния нейтронов.
17. Дифракция нейтронов на соединениях с дальним магнитным порядком. Дифракция нейтронов на несоизмеримой структуре.
18. Нейтронная рефлектометрия. Принципы нейтронной рефлектометрии.
19. Определение величины мелкодисперсности нанокристаллитов методом полнопрофильного анализа.
20. Определение величины микронапряжений нанокристаллитов методом полнопрофильного анализа.

8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО http://fepo.i-exam.ru.

8.3.8. Интернет-тренажеры

Не используются.