

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



Первый проректор, проректор по научной
и инновационной работе

В.Г. Прокошев

« 03 » июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА»

(наименование дисциплины)

Направление подготовки 03.06.01 Физика и астрономия

Направленность (профиль) подготовки Физика конденсированного состояния

Уровень высшего образования Подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения очная

| Год | Трудоём- кость зач. ед, час. | Лек- ции, час. | Практич. занятия, час. | Лаборат. работы, час. | СРА, час. | Форма промежуточного контроля (экз./зачет) |
|-------|---------------------------------------|----------------------|------------------------------|-----------------------------|--------------|---|
| 2 | 2/72 | 20 | 4 | - | 48 | ЗАЧЕТ |
| Итого | 2/72 | 20 | 4 | - | 48 | ЗАЧЕТ |

г. Владимир 2015 г.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины (модуля) «Теория и практика структурного анализа» являются:

1. Знакомство с задачами структурного анализа, а также основными методами исследования вещества с использованием дифракции рентгеновского и синхротронного излучения, электронов и нейтронов.
2. углубленное изучение теоретических и методологических основ структурного анализа. В том числе: изучение фазовой проблемы и путей ее решения, методов расчета дифракционного спектра; знакомство с условиями Лауэ и формулой Вульфа-Брэгга, понятием обратной решетки, основами Фурье-анализа и Фурье-синтеза.
3. Освоение комплекса компьютерных программ SHELX-97 расшифровки и уточнения кристаллических структур по рентген-дифракционным данным и описания молекулярных и кристаллических структур.
4. Формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области структурного анализа кристаллов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОСНОВНОЙ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ (ОПОП ВО)

Освоение дисциплины опирается на знания, полученные при освоении другой обязательной дисциплины ОПОП (ВО) «Физика конденсированного состояния». В качестве «входных» следует указать знание аспирантами теории групп, точечной и пространственной симметрии кристаллов. Аспирант должен уметь выписывать преобразования симметрии для наиболее распространенных пространственных групп.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

- 1) Знать:
 - основы теории симметрии (ОПК – 1);
- 2) Уметь:
 - использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ОПК – 1);
 - использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ОПК – 1);
 - применять на практике базовые профессиональные навыки (ОПК – 1);
 - пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (ОПК – 1);
- 3) Владеть:
 - методами анализа и описания симметрии молекул, формы кристаллов, кристаллических структур (ОПК – 1);
 - методами вывода наиболее распространенных в природе пространственных групп симметрии кристаллов (ОПК – 1);

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц, 72 часов.

| № п/п | Раздел (тема) дисциплины | Год обучения | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах) | | | | Формы текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации |
|-------|---|--------------|---|----------------------|---------------------|-----|--|
| | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | СРА | |
| 1. | Рентгеновские трубки. Рентгеновские аппараты. Методы регистрации рентгеновского излучения. | 2 | 5 | 1 | - | 8 | Тестирование |
| 2. | Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Обратная решетка. Сфера Эвальда. Уравнения Лауэ, уравнение Вульфа - Бреггов. | 2 | 5 | 1 | - | 8 | Тестирование |
| 3. | Основные методы рентгеноструктурного анализа. Структурный фактор. | 2 | 5 | 1 | - | 12 | Тестирование |
| 4. | 1. Этапы расшифровки атомной структуры кристаллов. Интерференция рентгеновских лучей рассеянных кристаллами. 2. Количественный и качественный фазовый анализ. Прецизионное определение | 2 | 5 | 1 | - | 20 | Тестирование |

| | | | | | | | |
|---|--|-----------|----------|----------|-----------|--------------|--|
| параметров решетки кристаллического вещества. 3. Современные методы исследования структур с помощью рентгеновских лучей: топография, малоугловые исследования. | | | | | | | |
| ИТОГО: | | 20 | 4 | - | 48 | ЗАЧЕТ | |

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Освоение дисциплины «Теория и практика структурного анализа» предполагает использование следующих инновационных форм проведения занятий:

- опережающее обучение (темы 1-4);
- проблемное обучение (темы 2-4);
- компьютерный тренинг (темы 2-3);

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ АСПИРАНТОВ

Вопросы к зачету

1. Рассеяние рентгеновских лучей электроном и атомом.
2. Рассеяние группой атомов. Структурный фактор как вектор на плоскости. Фаза и модуль структурного фактора.
3. Факторы, влияющие на измеряемую интенсивность. (Кинематический фактор, поглощение, экстинция)
4. Учет поглощения рентгеновских лучей в монокристалльном образце.
5. Определение дифракционного класса по экспериментальным данным. Перестановка осей.
6. Фазовая проблема РСА и основные методы ее решения.
7. Матричное представление симметрии пространственной группы. Преобразование индексов Мюллера, точечная и дифракционная симметрия. Погасания рефлексов.
8. Функция Паттерсона (ФП) в интегральном виде и в виде ряда Фурье. Основное и векторное пространство.
9. Свойства ФП: симметрия, координаты, ширины и веса максимумов.
10. Основная и векторная система точек. Особенности расположения пиков векторной системы, построенной для centrosymmetric основной системы.
11. Разностная и обостренная ФП.
12. Пики связки (Харкера) и пики взаимодействия в ФП.
13. Использование харкеровских сечений для определения координат атомов. Решение проблемы неоднозначности.

14. Общий метод выделения основной системы из векторной. Функции, выделяющие изображение основной системы.
15. Метод приведения измеренных интенсивностей к абсолютной шкале.
16. Нормализация структурных факторов.
17. Основа прямого метода нахождения фаз. Неравенства Харкера-Каспера, равенство Сейера.
18. Тангенс-формула Карле-Хауптмана.
19. Тройные произведения (триплеты). Вероятностная оценка равенства нулю суммы фаз.
20. Структурные инварианты и полуинварианты. Фиксация начала координат и энантиоморфизма.
21. Многовариантный метод расчета фаз. Уточнение фаз, критерии отбора наилучших вариантов.
22. Квартеты и их использование при нахождении фаз прямым методом.
23. Е-синтезы и их анализ.
24. Виды синтезов Фурье, применяемых в РСА.
25. Влияние обрыва ряда и методы устранения.
26. Полный и частичный разностный синтез электронной плотности.
27. Уточнение структуры методом Фурье синтеза.
28. Принцип метода наименьших квадратов (МНК). Матрица нормальных уравнений (свойства). Корреляционная матрица.
29. Полноматричный, блок-диагональный и диагональный МНК. Этап и итерация в МНК.
30. Уточняемые параметры структуры. Эффекты корреляции параметров.
31. МНК с наложением ограничений.
32. Изотропный и анизотропный температурный фактор атома.
33. Учет ангармонизма колебаний атома при уточнении температурного фактора атома.
34. Триклинная и ортогональная система координат. Основные параметры структуры, рассчитываемые из координат атомов. Вероятностная оценка погрешности структурных параметров.
35. Принцип автоматизации РСА. Эксперимент, обработка, проведение вычислений.

Темы рефератов по дисциплине (самостоятельная работа)

1. Современные автоматические монокристалльные дифрактометры и их математическое обеспечение.
2. Современные методы исследования структур с помощью рентгеновских лучей: топография, малоугловые исследования.
3. Двукристалльные и трехкристалльные спектрометры. Рефлектометрия.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

| № п/п | Название и выходные данные (автор, вид издания, издательство, издания, количество страниц) | Год издания | Количество экземпляров в библиотеке университета | Наличие в электронной библиотеке ВлГУ | Количество аспирантов, использующих указанную литературу | Обеспеченность аспирантов литературой, % |
|----------------------------|--|-------------|--|---------------------------------------|--|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| Основная литература | | | | | | |
| 1. | Межмолекулярные | 2014 | | ЭБС | 1 | 100 |

| | | | | | | |
|----|---|------|--|--|---|-----|
| | взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М.: БИНОМ, 2014. | | | «Консультант студента» www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556 | | |
| 2. | Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М.: БИНОМ, 2014. | 2014 | | ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623 | 1 | 100 |
| 3. | Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с - ISBN: 978-5-369-00967-3 | 2013 | | ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421 | 1 | 100 |
| 4. | Физика конденсированного состояния [Электронный ресурс] / Байков Ю.А., Кузнецов В.М. - М.: БИНОМ, 2013. | 2013 | | ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596 | 1 | 100 |
| 5. | Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] / Цирельсон В.Г. - | 2012 | | ЭБС «Консультант студента» http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982 | 1 | 100 |

| | | | | | | |
|----------------------------------|--|------|---|--|---|-----|
| | М.: БИНОМ, 2012. | | | | | |
| Дополнительная литература | | | | | | |
| 1 | Физическое материаловедение. Ч. 2. Фазовые превращения в металлах и сплавах [Электронный ресурс] : учеб. пособие. В 3 ч. / А.К. Федотов. – Минск : Выш. шк., 2012. – 446 с.: ил. - ISBN 978-985-06-2063-7. | 2012 | | ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508082 | 1 | 100 |
| 2 | Дифракционный анализ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.М. Анищик, В.В. Понарядов, В.В. Углов. – Минск: Выш. шк., 2011. – 215 с - ISBN 978-985-06-1834-4 | 2011 | | ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=506981 | 1 | 100 |
| 3 | Малеев, Андрей Владимирович. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов : монография / А. В. Малеев, А. В. Шутов ; ВлГУ .— ВлГУ.— 107 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 100-107 .— ISBN 978-5-8311-0546-9. | 2011 | 5 | | 1 | 33 |

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Cambridge Structural Database System. Version 1.18. Cambridge Crystallographic Data Centre, 2015.
2. Программный комплекс для исследования координационных окружений в модели послойного роста графов связанности (регистрационный номер №2013619399).

3. Программа перебора вариантов периодических упаковок полигексов в плоскости (регистрационный номер №2014661669).
4. Программа перебора вариантов периодических упаковок полимино в плоскости (регистрационный номер №2013619301).
5. Программа сравнения молекулярных упаковок в кристаллических структурах (регистрационный номер №2015662262).
6. <http://crystal.geology.spbu.ru/studies/materiaux-denseignement>
7. <http://ums.usu.ru/x-ray/Labs1-4/>

Периодические издания:


1. Журнал структурной химии
2. Кристаллография

**8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ
(МОДУЛЯ)**

1. Супер-ЭВМ «СКИФ-Мономах».
2. Персональные компьютеры типа Core i7 2,4 ГГц (16 GB RAM).
3. По договорам о творческом содружестве ВлГУ с Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Нижегородским государственным университетом им. Н.И. Лобачевского имеется возможность проведения экспериментов на современных автоматических монокристалльных дифрактометрах.
4. Доступ к базе данных Cambridge Crystallographic Data Center (CDC).


Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия и направленности (профилю) подготовки Физика конденсированного состояния

Рабочую программу составил  д.ф.-м.н, доц. А.В. Малеев

Рецензент (ы)  д.ф.-м.н., профессор кафедры информационных технологий Владимирского филиала Российской академии народного хозяйства и государственной службы при президенте Российской Федерации (РАНХиГС) В.Г. Рау

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры общей и теоретической физики

протокол № 10 от 03.06.2015 года.

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 03.06.01 - физика и астрономия

Протокол № 1 от 03.06.2015 года

Председатель комиссии 

(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
«ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА»**

Рабочая программа одобрена на 2016/2017 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.16 года

Заведующий кафедрой _____



Рабочая программа одобрена на 2017/2018 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года

Заведующий кафедрой _____



Рабочая программа одобрена на 2018/2019 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.18 года

Заведующий кафедрой _____



Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____