

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.							
<b>ИТОГО:</b>		<b>20</b>	<b>4</b>	<b>-</b>	<b>48</b>	<b>ЗАЧЕТ</b>	

## 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
<b>Основная литература</b>						
1.	Межмолекулярные	2014		ЭБС	1	100

	взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М.: БИНОМ, 2014.			«Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556">www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556</a>		
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» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623</a>	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» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=363421</a>	1	100
4.	Физика конденсированного состояния [Электронный ресурс] / Байков Ю.А., Кузнецов В.М. - М.: БИНОМ, 2013.	2013		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322596</a>	1	100
5.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] / Цирельсон В.Г. -	2012		ЭБС «Консультант студента» <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310982</a>	1	100

	М.: БИНОМ, 2012.					
<b>Дополнительная литература</b>						
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» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508082">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508082</a>	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» <a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=506981">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=506981</a>	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**

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ  
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Рабочая программа одобрена на 2020/21 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.20 года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_



А.В. Машев