

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
ФИЛИАЛ МГУ В Г. ДУБНЕ



УТВЕРЖДАЮ
И.о. директора
филиала МГУ в г.Дубне
/ Э.Э. Боос /
«14» 09 2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

Дифракция нейтронов и структурный анализ

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) ОПОП:

Фундаментальная и прикладная ядерная физика

Форма обучения: Очная форма обучения

Дубна 2022 г.

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки программы магистратуры 03.04.02 «Физика».

Год (годы) приема на обучение _____

Авторы–составители:

доктор физ.-мат. наук, профессор Балагуров Анатолий Михайлович, по совместительству профессор физического факультета МГУ

Руководитель магистерской программы:

Доктор физ.-мат. наук, академик РАН Г.В. Трубников, заведующий кафедрой физического факультета МГУ

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Дифракция нейтронов и структурный анализ»

В курсе рассмотрены вопросы, необходимые для понимания современного состояния структурной нейтронографии, и, прежде всего, нейтронографии на импульсных источниках нейтронов. Курс включает три основные темы: симметрия кристаллов, дифракция излучения на кристаллической решетке, основы структурного анализа кристаллов. Первая из них является традиционной для курсов кристаллографии, две других излагаются с учетом специфики взаимодействия нейтронов с веществом и их дифракции на периодических структурах.

Разделы рабочей программы

1. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО).
2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (при наличии)
3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с формируемыми компетенциями
4. Формат обучения.
5. Язык обучения.
6. Содержание дисциплины.
7. Объем дисциплины
8. Структурированное по темам (разделам) содержание дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий
9. Текущий контроль и промежуточная аттестация.
10. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю).
11. Шкала оценивания.
12. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.
13. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.
14. Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина «Дифракция нейтронов и структурный анализ» реализуется на 1-ом курсе в 1-ом семестре магистратуры и входит в состав профессионального блока вариативной части.

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

Базовые знания в области общей и теоретической физики в объеме классических университетских курсов.

3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с формируемыми компетенциями

В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
МПК-1 Способен решать практические задачи профессиональной деятельности в области фундаментальной и прикладной ядерной физики на основе фундаментальных знаний	ИМПК-1.1 знает основные разделы фундаментальной и прикладной ядерной физики: модели атомного ядра и ядерных реакций, основы нейтронной физики и физики конденсированного состояния, базовые установки и приборы ядерно-физического эксперимента.	Знать: основные возникающие задачи и методы, используемые для их описания и решения в физике нейтронов. Уметь: решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики. Владеть: способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах.

1. **Форма обучения:** очная.

2. **Язык обучения:** русский.

3. **Содержание дисциплины**

Тема 1. Классическая кристаллография.

Основные свойства кристаллов. Дальний порядок. Симметрия. Кристаллическая решетка и элементарная ячейка. Сингонии и ячейки Браве. Обратная решетка. Межплоскостное расстояние. Пространственная симметрия кристаллов. Элементы симметрии. Пространственные группы симметрии. Точечные группы симметрии. Предельные группы симметрии. Групповые свойства элементов симметрии. Матричное представление элементов симметрии. Преобразования при смене системы координат.

Тема 2. Основы теории дифракции нейтронов.

Условия возникновения дифракции. Когерентность плоских волн. Дифракция на решетке. Пространственная когерентность. Когерентная и некогерентная амплитуды рассеяния. Принцип Гюйгенса-Френеля. Рассеяние волны на периодической структуре. Функция Дирака. Интерференционная функция Лауэ. Формула Вульфа – Брэгга. Упругое когерентное рассеяние. Связь с корреляционной функцией. Упругое рассеяние как фурье-преобразование структуры. Рассеивающая плотность и функция Паттерсона. Амплитуда, интенсивность, объект, изображение. Современные исследовательские источники нейтронов. Максвелловский спектр тепловых нейтронов. Нейтронные дифрактометры на разных типах нейтронных источников. Типы нейтронных дифрактометров, их оптимизация.

Тема 3. Структурный анализ поли- и монокристаллов.

Сечение рассеяния и структурный фактор. Интенсивность дифракционных пиков. Учет поправок при переходе от интенсивности к структурному фактору. Фактор Лоренца. Фактор поглощения. Коэффициент экстинкции. Эффективный спектр нейтронов. Расчет структурных факторов. Тепловой фактор. Основные задачи структурного анализа. Структурный анализ монокристаллов. Фурье-синтезы. Уточнение структуры поликристаллов – параметрическая задача. Метод Ритвельда в структурной нейтронографии. Анализ локальной структуры. Метод PDF. Определение из дифракционного эксперимента основных характеристик магнитной структуры кристалла. Прикладные задачи нейтронографии. Определение текстуры. Анализ микро- и макронапряжений.

7. Объем дисциплины

НАЗВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ	в за че тн ы х Тру дое мко сть	объем учебной нагрузки в ак. часах					
		Общая трудое мкость	в том числе ауд.занятий				Самост оятельн ая работа студент ов
			Общая аудио рная нагруз ка	Ле кц ий	Се ми нар ов	Учебн о- практи ческие заняти я	
	2	72	36	18	18	36	

8. Структурированное по темам (разделам) содержание дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Изучение курса «» включает в себя лекции, на которых рассматривается теоретическое содержание курса; семинарские занятия, предусматривающие углубленное изучение и обсуждение вопросов, обозначенных в темах дисциплины; самостоятельную работу, заключающуюся в подготовке к лекционным и семинарским занятиям. Темы, рассматриваемые на лекциях и изучаемые самостоятельно, закрепляются на семинарских занятиях, по вопросам, вызывающим затруднения, проводятся консультации.

№ тем ы		Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы					Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
		Вс его ча со в	Ле кц ии	С е м и на р ы	Учебно-практические занятия (лабораторные или практические занятия)	Самостоятельная работа	
1	Классическая кристаллография	22	6	6		10	опрос
2	Основы теории дифракции нейтронов	22	6	6		10	контрольная
3	Структурный анализ поли- и монокристаллов	22	6	6		10	опрос
	Промежуточная аттестация	6				6	экзамен
ИТОГО:		72	18	18		36	

ДЗ- домашнее задание, Оп- опрос, КР- контрольная работа, Т- тестирование

9. Текущий контроль и промежуточная аттестация.

Текущий контроль по дисциплине «Дифракция нейтронов и структурный анализ» осуществляется на лекциях и семинарских занятиях и заключается в оценке активности и качества участия в опросах и собеседованиях по проблемам, изучаемых в рамках тем лекционных занятий, аргументированности позиции; оценивается широта используемых теоретических знаний.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Дифракция нейтронов и структурный анализ» проводится в первом семестре в форме экзамена в виде письменной работы.

Результаты сдачи экзамена оцениваются по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

10. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю).

Перечень оценочных средств, применяемых на каждом этапе проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине, представлены в таблице

Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде
----------------------------------	--	---

Оценочные средства текущего контроля		
Тематический опрос (в форме ответов на вопросы)	Средство контроля, организованное как специальная беседа по тематике предыдущей лекции и рассчитанное на выяснение объема и качества знаний, усвоенных обучающимися по определенному разделу, теме, проблеме.	Перечень тем, изучаемых в рамках дисциплины
Собеседование (в форме беседы, дискуссии по теме)	Средство контроля, организованное как свободная беседа, дискуссия по тематике изучаемой дисциплины, рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по всем изученным разделам, темам; свободного использования терминологии для аргументированного выражения собственной позиции.	Перечень тем, изучаемых в рамках дисциплины
Тестирование	Средство контроля, позволяющее получить оценку уровня фактических знаний аспиранта по изученной теме.	Образцы тестов
Оценочные средства промежуточной аттестации		
Письменная работа	Средство, позволяющее оценить сформированность систематических представлений о методах научно-исследовательской деятельности.	Перечень вопросов к экзамену
Собеседование	Средство, позволяющее получить экспертную оценку знаний, умений и навыков по для оценивания и анализа различных фактов и явлений в своей профессиональной области.	Требования к порядку проведения собеседования

11. Шкала оценивания.

Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения			
	2/ не зачтено	3/ зачтено	4/ зачтено	5/ зачтено
ЗНАТЬ: основные возникающие задачи и методы, используемые для их описания и решения в физике нейтронов ИМПК-1.1 3-1	Отсутствие знаний основных возникающих задач и методов, используемых для их описания и решения в физике нейтронов	В целом успешные, но не систематически знания основных возникающих задач и методов, используемых для их описания и решения в физике нейтронов	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы знания основных возникающих задач и методов, используемых для их описания и решения в физике нейтронов	Успешные и систематические знания основных возникающих задач и методов, используемых для их описания и решения в физике нейтронов

УМЕТЬ: решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики ИМПК-1.1 У-1	Отсутствие умения решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики	В целом успешное, но не систематическое умение решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы умение решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики	Успешное и систематическое умение решать задачи нейтронной физики и связанных разделов ядерной физики
ВЛАДЕТЬ: способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах ИМПК-1.1 В-1	Отсутствие/фрагментарное владение способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах	В целом успешное, но не систематическое владение способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы владение способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах	Успешное и систематическое владение способностью анализировать задачи и явления, связанные с нейтронной и ядерной физикой, и делать выводы о структурных формах и свойствах

12. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Материалы текущего контроля успеваемости обучающихся

Пример:

Вопросы по теории:

1. Групповые свойства элементов симметрии.
2. Матричное представление элементов симметрии.
3. Упругое рассеяние как фурье-преобразование структуры.
4. Построение Эвальда. Сферы отражения и ограничения в случае $\lambda = \lambda_0$.

Задачи:

1. Вывести формулу для d_{hkl} в случае тетрагональной решетки.
2. Определить направления единичных векторов обратного базиса для гексагональной сингонии.
3. Произвести размещение элементов симметрии в пр. гр. $P2_1/m$.
4. Рассчитать структурный фактор для F-решетки.

13. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Экзамен проводится в форме письменной работы с устным ответом.

Материалы промежуточной аттестации обучающихся

Вопросов к экзамену:

1. Кристаллическое состояние вещества: дальний порядок, решетка, ячейка, структура.
2. Симметрия кристаллических структур. Сингонии.
3. Групповые свойства элементов симметрии.
4. Матричное представление элементов симметрии.
5. Простые и центрированные ячейки Браве.
6. Взаимный векторный базис и обратная решетка.
7. Индексы Миллера. Расчет межплоскостных расстояний.
8. Рассеяние излучения на периодической структуре. Принцип Гюйгенса-Френеля.
9. Формула Вульфа-Брэгга.
10. Упругое рассеяние как фурье-преобразование структуры.
11. Построение Эвальда. Сферы отражения и ограничения в случае $L=L_0$.
12. Построение Эвальда в случае “белого” пучка. Многомерная дифракция.
13. Интерференционная функция Лауэ.
14. Построение Эвальда. Сферы отражения и ограничения в случае $L=L_0$.
15. Построение Эвальда в случае “белого” пучка. Многомерная дифракция.
16. Когерентное и некогерентное рассеяние нейтронов.
17. Исследовательские источники нейтронов.
18. Нейтронные дифрактометры на стационарном и импульсном источниках.
19. Структурный фактор. Фазовая проблема структурного анализа.
20. Переход от интенсивностей дифракционных пиков к структурным факторам.
21. Влияние теплового движения атомов на дифракцию излучения.

14. Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

Основная литература

1. А.М.Балагуров “Дифракция нейтронов для решения структурных и материаловедческих задач” Учебное пособие, Физфак МГУ им. М.В.Ломоносова, 2017
2. Б.К. Вайнштейн “Симметрия кристаллов”, “Современная кристаллография”, т.1, М., Наука, 1979.
3. Ю.З. Нозик, Р.П.Озеров, К. Хениг “Структурная нейтронография” М., Атомиздат, 1979.

Дополнительная литература

1. М.П. Шаскольская “Кристаллография” М., Высшая школа, 1976
2. И.И. Гуревич, Л.В.Тарасов “Физика нейтронов низких энергий” М., Наука, 1965.
3. В.Л.Аксенов, А.М.Балагуров “Времяпролетная нейтронная дифрактометрия” УФН, т.166(9), с.955-986, 1996.

4. В.Л.Аксенов, А.М.Балагуров. Дифракция нейтронов на импульсных источниках. УФН, т. 186, № 3, с. 293, 2016.

При реализации дисциплины может быть использовано следующее программное обеспечение:

1. Операционная система Astra Linux (<https://astralinux.ru/>) или аналог, с офисным пакетом, с пакетами разработчика.

Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. База данных РИНЦ (российский индекс научного цитирования)
<http://www.elibrary.ru>

Материально-техническое обеспечение

В соответствии с требованиями п. 5.3. образовательного стандарта МГУ по направлению подготовки «Физика», курс может быть прочитан в поточной аудитории при наличии: работающих электрических розеток, компьютера, проектора, экрана, учебной доски.