

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**
**«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)**
Физический факультет
Кафедра физических методов исследования твёрдого тела



Рабочая программа дисциплины
СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ НАНОКРИСТАЛЛОВ

Направление подготовки: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): **Физика. Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения **Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная ра- бота, не включая пе- риод сессии	Самостоятельная подготовка к проме- жуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференциро- ванный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
3	72	16	16	16	22				2	
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 50 часов										
Компетенции ПК-1										

Ответственный за образовательную программу
д.ф.-м.н., проф.

С. В. Цыбуля

Новосибирск, 2026

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	5
5. Перечень учебной литературы.	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	8
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	8
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	8
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	8
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	9

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Дисциплина «Структурный анализ нанокристаллов» имеет своей целью дать общие представления о специфике строения нанокристаллических систем, структурных моделях, адекватных описанию наноструктур различного типа, особенностях применения физических методов исследования для изучения ультрадисперсных и наноструктурированных материалов.

Дисциплина нацелена на формирование у магистрантов профессиональных компетенций:

Дисциплина «Структурный анализ нанокристаллов» преподаётся классическим способом – читаются лекции и проводятся практические занятия с постановкой промежуточных вопросов. При подаче материала лекционного курса используется мультимедийная техника. На экран выводятся определения, основные понятия, графические иллюстрации, помогающие наглядно представить материал. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме с обсуждением лекционного материала на конкретных примерах. Все магистранты готовят сообщения по разделам дисциплины, по возможности близким к темам магистерских работ слушателей (темы сообщений определяются преподавателем совместно со студентами на первых занятиях курса), с которым выступают на занятиях, отвечая на вопросы преподавателя и сокурсников.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования и/или экспериментальной физики в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать - основные методы и подходы к определению атомной структуры объектов с различной степенью дальнего порядка по дифракционным данным; - возможности экспериментальных методов рентгеноструктурного анализа поли- и нанокристаллических материалов. Уметь планировать комплексные физико-химические исследования нанокристаллических систем, выбрав соответствующие решаемой задаче методы анализа и адекватные структурные модели; выполнять фазовый анализ многокомпонентных систем, включающих нанокристаллические фазы.

		Владеть теоретическими представлениями об особенностях рассеяния рентгеновских лучей на несовершенных кристаллах, кристаллитах малых (нано) размеров, наноструктурированных системах; навыками работы с программными продуктами, позволяющими проводить анализ и моделирование дифракционных картин.
--	--	---

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Структурный анализ нанокристаллов» является одной из дисциплин по выбору по направлению подготовки 03.04.02 Физика Курс «Структурный анализ нанокристаллов» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата. Дисциплина должна предшествовать выполнению магистерской диссертации т.к. дает магистранту необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения структурных исследований наноматериалов в рамках подготовки его квалификационной работы.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоёмкость дисциплины составляет: 2 зачётные единицы, 72 часа.

Форма промежуточной аттестации: 3 семестр – дифференцированный зачёт

№	Вид деятельности	Семестр
		3
1	Лекции, ч	16
2	Практические занятия, ч	16
3	Лабораторные занятия, ч	16
4	Занятия в контактной форме, ч из них	50
5	аудиторных занятий, ч	48
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	-
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	22
10	Всего, ч	72

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

Раздел 1. Наноразмерные и наноструктурированные системы. Основные определения (6 часов).

1. Введение: задачи структурных исследований наноматериалов. Определение нанокристалла. Соотношение понятий «наночастица», «нанокристалл», «наноструктура», «нанотекстура». Соотношение понятий «кристалл», «нанокристалл», «модулированный кристалл», «паракристалл», «квазикристалл». Существующие классификации наноструктурированных систем. Специфика наноматериалов как объектов структурного анализа в физике и химии твердого тела. Наноразмерные частицы и кластеры. Наночастицы на подложках, в полимерах и в пористых матрицах. Наноструктуры.
2. Наноструктурированные системы. Нанокристаллические пленки. Компактированные наноматериалы. Межзеренные и межблочные границы. Типы границ. Дислокационные модели описания структуры границ. Поля деформаций, источниками которых являются межблочные границы. Свойства наноматериалов, определяемые структурой межблочных границ и пористые агрегаты. Пористая структура. Текстура. Структурные параметры, характеризующие наноматериал и подлежащие контролю при его синтезе и аттестации.
3. Условия формирования нанокристаллических состояний. Самоорганизующиеся наносистемы. Некоторые термодинамические представления о нанокристаллическом состоянии вещества. Верхняя и нижняя границы размеров для нанокристаллического состояния.
4. Некоторые физические и химические свойства наноразмерных и наноструктурированных материалов: структурные и фазовые превращения, магнитные характеристики, оптические свойства, электрофизические свойства, химическая активность, каталитические свойства. Размерные эффекты.

Раздел II. Методы исследования структуры нанокристаллических систем (6 часов).

5. Принципиальные возможности рентгеновской дифракции, дифракции электронов, электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии, адсорбционных, магнитных и других физико-химических методов в исследовании атомной структуры и наноструктуры материалов. Соотношение «размеров» наночастиц, определяемых по данным различных методов.
6. Современное состояние в области техники эксперимента. Порошковые дифрактометры: новейшие разработки систем монохроматизации и коллимации. Геометрия параллельного пучка. Одно- и многоканальные детекторы. Возможности проведения эксперимента в нестандартных условиях: высокие и низкие температуры, высокое давление, контролируемые газовые среды. Электронные микроскопы. Новейшие разработки для получения предельно высокого разрешения. Аналитические приставки: локальный химический анализ. Системы сканирования и картирования образцов.
7. Особенности рентгеновской дифракции для наноразмерных и наноструктурированных объектов. Методики анализа рентгеновских дифракционных картин – современное состояние. Рентгенофазовый анализ нанокристаллов (качественный и количественный). Определение и уточнение параметров решетки. Проблема твердых растворов.

8. Влияние формы и размеров частиц на рентгеновские дифракционные картины. Распределение частиц по размерам. Теорема Берто. Методы определения средних размеров наночастиц (ОКР) и параметров распределения по размерам, основанные на анализе уширения и формы отдельных дифракционных пиков. Проблема раздельного определения размеров частиц (наноблоков) и параметров, характеризующих микродеформации структуры. Поля деформаций, источниками которых являются внешняя поверхность и межблочные границы. Паракристаллические искажения решетки.
9. Определение атомной структуры нанокристаллов. Методы полнопрофильного анализа дифракционных картин. Метод Ритвельда в применении к нанокристаллам.
10. Рентгеноструктурный анализ одномерно разупорядоченных объектов и 1D наноструктур. Определение концентрации дефектов смещения слоев. Специфические особенности дифракции для частично ориентированных (текстурированных) 1D и 3D наноструктур.
11. Методы рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии для изучения ближнего порядка в наноматериалах.
12. Возможности метода малоуглового рассеяния для определения характерных размеров флуктуации электронной плотности.
13. Электронная микроскопия в применение к исследованию различных типов наноматериалов. Электронная микроскопия высокого разрешения. Микродифракция. Электронная томография.
14. Методы адсорбции и порометрии в применении к исследованию наноматериалов с развитой удельной поверхностью.

Раздел 3. Методы синтеза нанокристаллических материалов и примеры их исследования

(4 часа)

15. Методы синтеза наноматериалов. Термическое разложение. Восстановление и окисление. Локальное упорядочение нестехиометрических соединений. Распад неравновесных твердых растворов. Кристаллизация аморфных сплавов. Газофазный синтез (конденсация паров). Механосинтез и механическая диспергация. Плазмохимический синтез. Детонационный синтез и электровзрыв.
16. Механохимический синтез металлических и оксидных нанопорошков. Композитные материалы, получаемые методами механосинтеза и механоактивации. Механохимически синтезированные сплавы – нано- или паракристаллы?
17. Углеродные наноматериалы. Частично разупорядоченный графит. Фуллерены. Нанотрубки. Каталитический волокнистый углерод. Турбостратная модель структуры углеродных материалов.
18. Оксиды, получаемые путем низкотемпературного разложения солей и гидроксидов. Наноструктурированные оксиды железа, алюминия, кобальта. Наногетерогенные твердые растворы на основе структурных типов шпинели, перовскита, флюорита.

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1. Знакомство с лабораторным оборудованием для проведения дифракционных исследований поликристаллических материалов. Требования к подготовке проб **(2 часа)**.

Занятия 2 - 3. Формула Шеррера и метод Вильямсона-Холла для расчета размеров ОКР и оценки величины микродеформаций. Анализ рентгенограмм серий образцов с варьируемыми условиями синтеза **(4 часа)**.

Занятия 4 - 5. Обсуждение результатов моделирования дифракционных картин наноразмерных и наноструктурированных объектов, выполненных в рамках лабораторных занятий **(4 часа)**.

Занятия 6-8. Заслушивание и обсуждение сообщений, обучающихся по темам, выбранным ими для самостоятельной подготовки. **(6 часов)**.

Программа лабораторных занятий (16 часов)

Занятие 1 Построение, визуализация моделей атомных структур и расчет теоретических рентгенограмм совершенных поликристаллических объектов **(2 часа)**.

Занятия 2- 3. Моделирование дифракционных картин для наноразмерных объектов с использованием формулы Дебая: влияние размеров, формы кристаллитов на вид дифракционных картин. Работа с программой DIANNA. **(4 часа)**.

Занятие 4. Построение моделей и расчет дифракционных картин для структур, содержащих дефекты упаковки: металлы с гцк и гпу структурами) **(2 часа)**.

Занятие 5. Построение моделей и расчет дифракционных картин для структур с турбостратным разупорядочением: графитоподобные системы **(2 часа)**.

Занятие 6. Построение моделей и расчет дифракционных картин для слоистых структур, содержащих дефекты чередования слоев **(2 часа)**.

Занятия 7 - 8. Построение моделей 3D наноструктур и расчет дифракционных картин по формуле Дебая **(4 часа)**.

Самостоятельная работа студентов (22 часа)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	6
Подготовка к лабораторным занятиям	6
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	6
Подготовка к дифференцированному зачёту	4

5. Перечень учебной литературы.

1. С. В. Цыбуля, С. В. Черепанова. Введение в структурный анализ нанокристаллов. Учебное пособие. Новосибирск, НГУ - Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, 2009. - 90 с., ISBN 978-5-94356-762-9 (10 экз)
2. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений: [учеб. пособие для хим. спец. ун-тов] / М. А. Порай-Кошиц. М.: Высшая школа, 1989, 191 с. ISBN 5-06-000074-5. (2 экз)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. С. В. Цыбуля. Лекции по структурному анализу нанокристаллов: курс лекций. Новосибирск, НГУ - Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, 2012, 151 с.
<http://www.phys.nsu.ru/elib/cat/>

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

- программа DIANNA для моделирования дифракционных картин от ансамбля хаотически разориентированных наночастиц (разработчики: Д.А. Яценко, С.В. Цыбуля, Новосибирск, НГУ).
<https://sourceforge.net/projects/dianna/>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе заслушивания сообщений студентов на занятиях в виде презентаций на выбранные темы.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области рентгеноструктурного анализа нанокристаллов в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на дифференцированном зачёте. Он проводится в конце семестра по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
ПК-1	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследова-	Знать - основные методы и подходы к определению атомной структуры объектов с различной степенью дальнего порядка по дифракционным данным; - возможности экспериментальных методов рентгеноструктурного анализа поли- и	Заслушивание сообщений, дифференцированный зачет

	ний в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	нанокристаллических материалов. Уметь планировать комплексные физико-химические исследования нанокристаллических систем, выбрав соответствующие решаемой задаче методы анализа и адекватные структурные модели; выполнять фазовый анализ многокомпонентных систем, включающих нанокристаллические фазы. Владеть теоретическими представлениями об особенностях рассеяния рентгеновских лучей на несовершенных кристаллах, кристаллитах малых (нано) размеров, наноструктурированных системах; навыками работы с программными продуктами, позволяющими проводить анализ и моделирование дифракционных картин.	
--	---	---	--

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Структурный анализ нанокристаллов».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<u>Дифференцированный зачёт:</u> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы.	<i>Отлично</i>

При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить непринципиальные неточности.	
<u>Дифференцированный зачёт:</u> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок.	<i>Хорошо</i>
<u>Дифференцированный зачёт:</u> – самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, а также затруднений при формулировке собственных суждений, – корректность применения терминов и понятий, с множественными ошибками, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.	<i>Удовлетворительно</i>
<u>Дифференцированный зачёт:</u> – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы.	<i>Неудовлетворительно</i>

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры тем сообщений:

1. Типы границ межблочных границ. Дислокационные модели описания структуры границ.
2. Свойства наноматериалов, определяемые структурой межблочных границ.
3. Электронная микроскопия в применение к исследованию различных типов наноматериалов.
4. Методы адсорбции и порометрии в применении к исследованию наноматериалов с развитой удельной поверхностью.
5. Соотношение «размеров» наночастиц, определяемых по данным различных методов.
6. Методы синтеза наноматериалов.

Вопросы на дифференцированном зачёте

1. Определение нанокристалла. Соотношение понятий «наночастица», «нанокристалл», «наноструктура», «нанотекстура». Соотношение понятий «кристалл», «нанокристалл», «модулированный кристалл», «паракристалл», «квазикристалл». Существующие классификации наноструктурированных систем.
2. Специфика наноматериалов как объектов структурного анализа в физике и химии твёрдого тела. Наноразмерные частицы и кластеры. Наночастицы на подложках, в полимерах и в пористых матрицах. Наноструктуры.
3. Наноструктурированные системы. Нанокристаллические пленки. Компактированные наноматериалы.
4. Межзеренные и межблочные границы. Типы границ. Дислокационные модели описания структуры границ. Свойства наноматериалов, определяемые структурой межблочных границ и пористые агрегаты.
5. Пористая структура. Текстура. Структурные параметры, характеризующие наноматериал и подлежащие контролю при его синтезе и аттестации.
6. Условия формирования нанокристаллических состояний. Самоорганизующиеся наносистемы.
7. Некоторые физические и химические свойства наноразмерных и наноструктурированных материалов: структурные и фазовые превращения, магнитные характеристики, оптические свойства, электрофизические свойства, химическая активность, каталитические свойства. Размерные эффекты
8. Принципиальные возможности рентгеновской дифракции в исследовании атомной структуры и наноструктуры материалов.
9. Принципиальные возможности дифракции электронов и электронной микроскопии.
10. Зондовая микроскопии.
11. Особенности рентгеновской дифракции для наноразмерных и наноструктурированных объектов.
12. Определение атомной структуры нанокристаллов. Методы полнопрофильного анализа дифракционных картин. Метод Ритвельда в применении к нанокристаллам.
13. Рентгеноструктурный анализ одномерно разупорядоченных объектов и 1D наноструктур. Определение концентрации дефектов смещения слоев. Специфические особенности дифракции для частично ориентированных (текстурированных) 1D и 3D наноструктур.
14. Методы рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии для изучения ближнего порядка в наноматериалах.
15. Возможности метода малоуглового рассеяния для определения характерных размеров флуктуации электронной плотности.
16. Методы адсорбции и порометрии в применении к исследованию наноматериалов с развитой удельной поверхностью.
17. Методы синтеза наноматериалов.
18. Механохимический синтез металлических и оксидных нанопорошков. Композитные материалы, получаемые методами механосинтеза и механоактивации.
19. Углеродные наноматериалы. Частично разупорядоченный графит. Фуллерены. Нанотрубки. Каталитический волокнистый углерод. Турбостратная модель структуры углеродных материалов.
20. Оксиды, получаемые путем низкотемпературного разложения солей и гидроксидов. Наноструктурированные оксиды железа, алюминия, кобальта. Наногетерогенные твердые растворы на основе структурных типов шпинели, перовскита, флюорита.

Пример билета на дифференцированном зачёте

1. Специфика наноматериалов как объектов структурного анализа в физике и химии твёрдого

тела.

2. Рентгеноструктурный анализ одномерно разупорядоченных объектов и 1D наноструктур.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.