

**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 нанокompозитных материалов**



**Рабочая программа дисциплины
ВВЕДЕНИЕ В СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ НАНОКРИСТАЛЛОВ**

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **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 работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

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.	7
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	7
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	7
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	8
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	8

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

Дисциплина «Введение в структурный анализ нанокристаллов» имеет своей целью дать обучающимся, не имеющим базовой подготовки в области кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, 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.

Цели курса – сформировать у студентов определенную систему знаний, навыков и умений в постановке и решении задач, связанных с использованием специализированных знаний в области физики для освоения профильных физических дисциплин и способность проводить научные экспериментальные исследования в избранной области - в части использования рентгеноструктурного анализа в применении к наноматериалам.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>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.</p> <p>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.</p>	<p>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.</p> <p>Уметь планировать комплексные физико-химические исследования нанокристаллических систем, выбрать соответствующие решаемой задаче методы анализа и адекватные структурные модели; строить атомные и полиэдрические модели кристаллических структур на основе справочных данных.</p> <p>Владеть теоретическими представлениями об особенностях рассеяния рентгеновских лучей на идеальных кристаллах, несовершенных кристаллах, кристаллитах малых (нано) размеров, наноструктурированных системах; навыками работы с программными продуктами, позволяющими проводить построение моделей атомных структур, анализ и моделирование дифракционных картин.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Введение в структурный анализ нанокристаллов» является одной из дисциплин по выбору по направлению подготовки 03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика»). Дисциплина «Введение в 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. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента, консультации, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль успеваемости: контрольные вопросы на знание материала предыдущей лекции, заслушивание сообщений, самостоятельно подготовленных магистрантами по заданным темам.

Промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультации и экзамен) – 22 часа;

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

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

Дисциплина «Введение в структурный анализ нанокристаллов» представляет собой полугодовой курс, читаемый в магистратуре физического факультета НГУ во втором семестре. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Основные понятия кристалло-графии	1-4	12	4	4	4	
2	Наноразмерные и наноструктурированные системы. Основные определения, классификация, структура.	5-6	10	2	2	6	
3	Методы исследования структуры нанокристаллических систем	7-16	28	10	10	8	
4.	Самостоятельная подготовка к экзамену		18				18
5	Консультации перед экзаменом		2				2
6.	Экзамен		2				2
Всего			72	16	16	18	24

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

Раздел I. Основные понятия кристаллографии. (4 часа)

1. Введение: понятие о симметрии, симметрия в науке и искусстве. Предмет и задачи кристаллографии и структурного анализа. Кристаллы и кристаллическая структура. Пространственная (трансляционная) решетка. Элементарная ячейка. Индексы узлов, узловых рядов и узловых плоскостей решетки.
2. Кристаллические системы (сингонии), принципы классификации кристаллических систем. Решетки и ячейки Бравэ. Пространственные группы симметрии.

Раздел II. Наноразмерные и наноструктурированные системы. Основные определения, классификация, структура. (2 часа)

3. 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.

4. 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.

5. Условия формирования нанокристаллических состояний. Самоорганизующиеся наносистемы. Некоторые термодинамические представления о нанокристаллическом состоянии вещества. Верхняя и нижняя границы размеров для нанокристаллического состояния. 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 III Методы исследования структуры нанокристаллических систем. (10 часов)

6. 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.

7. 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.

8. 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.

9. 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.

10. Определение атомной структуры нанокристаллов. Методы полнопрофильного анализа дифракционных картин. Метод Ритвельда в применении к нанокристаллам.

11. Рентгеноструктурный анализ одномерно разупорядоченных объектов и 1D наноструктур. Определение концентрации дефектов смещения слоев. Специфические особенности дифракции для частично ориентированных (текстурированных) 1D и 3D наноструктур.

12. Методы рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии для изучения ближнего порядка в наноматериалах.

13. Возможности метода малоуглового рассеяния для определения характерных размеров флуктуации электронной плотности.

14. Электронная микроскопия в применение к исследованию различных типов наноматериалов. Электронная микроскопия высокого разрешения. Микродифракция. Электронная томография.

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1-2 Построение моделей кристаллических структур на основе справочных данных.

Занятия 3-6. Моделирование дифракционных картин для наноразмерных и наноструктурированных объектов с использованием формулы Дебая. Работа с программой DIANNA.

Занятия 7-8. Заслушивание и обсуждение сообщений, обучающихся по темам, выбранным ими для самостоятельной подготовки.

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям (завершение работ по построение моделей структур и расчета дифрактограмм, начатых на практических занятиях)	6
Подготовка сообщения по выбранной теме	12
Подготовка к экзамену	18

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.

3. 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

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/>

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

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

Для обеспечения реализации дисциплины используются аудитории, оборудованные всем необходимым для чтения лекций (доска, экран, компьютер, мультимедийный проектор), в том

числе стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

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, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), 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.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются следующие наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий:

- комплект лекций-презентаций по темам дисциплины.

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 семестра путем проведения выборочных опросов и заслушивания сообщений, самостоятельно подготовленных магистрантами по заданным темам и доложенных на практических занятиях. Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в виде экзамена.

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.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию 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.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
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.	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.	Проведение опроса, заслушивание сообщений, экзамен
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.	Уметь планировать комплексные физико-химические исследования нанокристаллических систем, выбрав соответствующие решаемой задаче методы анализа и адекватные структурные модели; строить атомные и полиэдрические модели кристаллических структур на основе справочных данных. Владеть теоретическими представлениями об особенностях рассеяния рентгеновских лучей на идеальных кристаллах, несовершенных кристаллах, кристаллитах малых (нано) размеров, наноструктурированных системах; навыками работы с программными продуктами, позволяющими проводить построение моделей атомных структур, анализ и моделирование дифракционных картин.	Проведение опроса, заслушивание сообщений, экзамен

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

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно

				несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.2	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

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

Примеры тем сообщений магистрантов на практических занятиях:

1. Типы границ межблочных границ. Дислокационные модели описания структуры границ.
2. Свойства наноматериалов, определяемые структурой межблочных границ.
3. Электронная микроскопия в применении 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.

Список вопросов, выносимых на экзамен

1. Основные понятия кристаллографии. Сингонии, кристаллические классы, пространственные группы симметрии.
2. Определение нанокристалла. Соотношение понятий «наночастица», «нанокристалл», «наноструктура», «нанотекстура». Соотношение понятий «кристалл», «нанокристалл», «модулированный кристалл», «паракристалл», «квазикристалл». Существующие классификации наноструктурированных систем.
3. 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.
4. Наноструктурированные системы. Нанокристаллические пленки. Компактированные наноматериалы.

5. Межзеренные и межблочные границы. Типы границ. Дислокационные модели описания структуры границ. Свойства наноматериалов, определяемые структурой межблочных границ и пористые агрегаты.
6. Пористая структура. Текстура. Структурные параметры, характеризующие наноматериал и подлежащие контролю при его синтезе и аттестации.
7. Условия формирования нанокристаллических состояний. Самоорганизующиеся наносистемы.
8. 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

-
1. Принципиальные возможности рентгеновской дифракции в исследовании атомной структуры и наноструктуры материалов.
 2. Принципиальные возможности дифракции электронов и электронной микроскопии.
 3. Зондовая микроскопии.
 4. Особенности рентгеновской дифракции для наноразмерных и наноструктурированных объектов. Влияние формы и размеров частиц на рентгеновские дифракционные картины.
 5. Определение атомной структуры нанокристаллов. Методы полнопрофильного анализа дифракционных картин. Метод Ритвельда в применении к нанокристаллам.
 6. Рентгеноструктурный анализ одномерно разупорядоченных объектов и 1D наноструктур. Определение концентрации дефектов смещения слоев. Специфические особенности дифракции для частично ориентированных (текстурированных) 1D и 3D наноструктур.
 7. Методы рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии для изучения ближнего порядка в наноматериалах.
 8. Возможности метода малоуглового рассеяния для определения характерных размеров флуктуации электронной плотности.

Пример экзаменационного билета

1. Специфика наноматериалов как объектов структурного анализа в физике и химии твердого тела
2. Влияние формы и размеров частиц на рентгеновские дифракционные картины.

Форма экзаменационного билета представлена на рисунке

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.

**Лист актуализации рабочей программы
дисциплины «Введение в структурный анализ нанокристаллов»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного