

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Б1.В.14 НЕЙТРОНОГРАФИЯ**

Направление подготовки (специальность) 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Профиль подготовки (специализация)

Форма обучения очная

Год набора 2024

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Программу составили  
доцент, к.ф.-м.н. Молокеев М.С.

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины:

Получение студентами знаний, необходимых для исследования строения магнитоупорядоченных кристаллических объектов при помощи дифракции нейтронов.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины:

Задачи изучения дисциплины: способствовать созданию у студентов представления о пространственно-симметричных особенностях строения магнитоупорядоченных кристаллов, формированию дифракционной картины при рассеянии нейтронов от них, способов получения дифракционной картины и определение структур магнитоупорядоченных соединений в ходе нейтрондифракционного эксперимента. Изучившие курс должны иметь представление о наборе задач, решаемых с помощью дифракции нейтронов и способах их решения.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы высшего образования:

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ПК-2 Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях	
ПК-2.1 Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	знать методы структурной нейтронографии; уметь применять знания в области структурной нейтронографии при проведении научных исследований
ПК-2.2 Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	знать задачи, решаемые с помощью дифракции нейтронов и способы их решения уметь исследовать свойства материалов с помощью структурного анализа

Дисциплина реализуется без применения ЭО и ДОТ

## 2 Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр
		10
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	2 (72)	2 (72)
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	1 (36)	1 (36)
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
<b>Самостоятельная работа обучающихся</b>	1 (36)	1 (36)
<b>Вид промежуточной аттестации (Зачет)</b>		Зачёт

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

№ п/п	Вид работ	Темы занятия	Объем часов	Семестр /курс	Часы в эл. формате
<b>Раздел 1. Экспериментальные методы структурной нейтронографии</b>					
1.	Лек	Источники нейтронов и рассеяние нейтронов кристаллами. Кристаллографические аспекты рассеяния нейтронов.	4	10	
2.	Лек	Факторы, определяющие интенсивность дифракционных отражений. Переход от интегральных интенсивностей к структурным факторам.	4	10	
3.	Лек	Поглощение нейтронов. Вторичная экстинкция. Аномальное рассеяние. Многократное рассеяние. Температурный фактор. Фактор интегральности (множитель Лоренца). Фактор повторяемости.	2	10	
4.	Лек	Дифракционные исследования на установках с постоянной длиной волны. Монохроматизация и коллимация первичного пучка нейтронов.	2	10	
5.	Лек	Расчет интенсивности упругого рассеяния нейтронов кристаллами	2	10	
6.	Лек	Учет факторов, определяющих интенсивность дифракционных отражений. Геометрические аспекты измерения интегральной интенсивности отражений	2	10	
7.	Лек	Расчет поглощения нейтронов, вторичной экстинкции, аномального рассеяния, температурного фактора, фактора интегральности	2	10	
8.	Лек	Простейшие расчеты нейтронограмм коллинеарных ферро- и антиферромагнетиков	2	10	
9.	Ср	Самостоятельная работа	18	10	
<b>Раздел 2. Теоретические основы нейтронографии магнитных структур</b>					
1.	Лек	Некоторые вопросы обработки нейтронограмм поликристаллических образцов. Метод белого пучка. Метод времени пролета. Стохастические прерыватели.	2	10	
2.	Лек	Симметрия магнитоупорядоченных кристаллов. Неприводимые представления пространственных групп. Шубниковские группы магнитоупорядоченных кристаллов. Представления шубниковских групп. Цветная магнитная симметрия. Приводимые представления пространственной группы на базисе локализованных атомных функций. Базисные функции неприводимых представлений пространственных групп.	2	10	
3.	Лек	Концепция фазовых переходов в описании магнитных структур. Построение магнитных структур из базисных функций.	2	10	
4.	Лек	Возможные типы магнитных решеток. Определение канала перехода или звезды волнового вектора из системы магнитных рефлексов. Определение магнитной структуры — второй этап нейтронографического исследования. Магнитное рассеяние нейтронов в структурно искаженных кристаллах. Атомный форм-фактор магнитного рассеяния. Методы выделения магнитной составляющей при рассеянии нейтронов.	2	10	
5.	Лек	Ознакомление с программой "Fullprof" для расчета нейтронограмм магнетиков. Метод Ритвельда уточнения структурных параметров	2	10	
6.	Лек	Расчет нейтронограмм магнетиков	2	10	
7.	Лек	Ознакомление с комплексом программ "Isotropy"	2	10	
8.	Лек	Симметричный анализ магнитных структур	2	10	
9.	Ср	Самостоятельная работа	18	10	
10.	Зачёт	Зачет		10	

#### **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

##### **4.1 Печатные и электронные издания:**

1. Головнев Н. Н., Молокеев М. С. 2-тиобарбитуровая кислота и ее комплексы с металлами: синтез, структура и свойства [Электронный ресурс]: монография. - Красноярск: СФУ, 2014. - 245 с. – Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i-386373133.pdf>.

2. Ищенко А. А., Гиричев Г. В., Тарасов Ю. И. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества: монография. - Москва: Физматлит, 2012. - 616 с..

3. Нозик Ю. З., Озеров Р. П., Хенниг К. Нейроны и твердое тело: Т. 1. Структурная нейтронография: в 3-х т.. - Москва: Атомиздат, 1979. - 344 с..

4. Изюмов Ю. А., Найш В. Е., Озеров Р. П. Нейтроны и твердое тело: Т. 2. Нейтронография магнетиков: в 3-х т.. - Москва: Атомиздат, 1981. - 311 с..

5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория [Электронный ресурс]: в 10 томах : учебное пособие для физических специальностей университетов : допущено Министерством высшего и среднего специального образования СССР. - Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. - 768 с. – Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/0073330.pdf>.

6. Изюмов Ю. А., Озеров Р. П. Магнитная нейтронография: монография. - Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1966. - 532 с..

7. Овчинников С. Г., Орлов Ю. С. Квантовая теория магнетизма [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие для самостоятельной работы [для студентов напр. 010700.62 «Физика», спец. 010701.65 «Физика», 010704.65 «Физика конденсированного состояния вещества»]. - Красноярск: СФУ, 2012. - – Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-165552.pdf>.

8. Волков Н. В., Попков С. И. Магнетизм твердых тел; диа- и парамагнетизм; магнитный порядок (физика магнитных явлений) [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие [для студентов программ 011200.68.02 «Физика конденсированного состояния вещества»; 011200.68.06 «Физика магнитных явлений»]. - Красноярск: СФУ, 2012. - – Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-885602.pdf>.

9. Зеер Г. М., Жарков С. М., Абкарян А. К. Методы структурного анализа и контроль качества изделий [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие. - Красноярск: СФУ, 2020. - – Режим доступа: <http://Lib3.sfu-kras.ru/ft/LIB2/ELIB/u620/i-047707252.pdf>.

##### **4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Windows Professional 10 Russian. Операционная система Windows.

2. Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian. Офисный пакет Microsoft Office.

3. Adobe Acrobat Reader DC . Программное обеспечение для просмотра и печати файлов PDF.

##### **4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Crystal impact <http://www.crystalimpact.com/diamond/10years.htm>.

2. Поисковая машина электронных книг. <http://www.poiskknig.ru>

3. Файловый архив для студентов <http://www.studfiles.ru>

4. Библиотечно-издательский комплекс СФУ <https://bik.sfu-kras.ru/elib/databases>

5. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [https://elibrary.ru/project\\_user\\_tools.asp](https://elibrary.ru/project_user_tools.asp)

## **5 Фонд оценочных средств**

Фонд оценочных средств является приложением к рабочей программе дисциплины (модуля), хранится на кафедре, обеспечивающей преподавание данной дисциплины (модуля).

## **6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

учебная аудитория для проведения лекционных, семинарских и практических занятий: Специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

помещение для самостоятельной работы обучающихся: специализированная мебель, демонстрационное оборудование, АРМ преподавателя, АРМ обучающихся, подключение к сети «Интернет» и индивидуальный неограниченный доступ в ЭИОС университета

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

По дисциплине (модулю)/ практике Б1.В.14 Нейтронография

Направление подготовки/специальность

03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Образовательная программа

03.05.02.30 Фундаментальная и прикладная физика

**1. Перечень компетенций с указанием индикаторов их достижения, соотнесенных с результатами обучения по дисциплине (модулю), практики и оценочными средствами**

Семестр <sup>1</sup>	Код и содержание индикатора компетенции	Результаты обучения <sup>2</sup>	Оценочные средства <sup>3</sup>
ПК-2: Способен применять физические закономерности взаимодействия излучения с веществом в современных технологиях			
10	ПК-2.1: Применяет закономерности взаимодействия излучения с веществом в результатах научных исследований	знать методы структурной нейтронографии	Индивидуальное задание; Контрольные вопросы к зачету
		уметь применять знания в области структурной нейтронографии при проведении научных исследований	Индивидуальное задание; Контрольные вопросы к зачету
10	ПК-2.2: Анализирует области применения высокоэнергетических воздействий на вещество в научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах	знать задачи, решаемые с помощью дифракции нейтронов и способы их решения	Индивидуальное задание; Контрольные вопросы к зачету

**2. Типовые оценочные средства или иные материалы, с описанием шкал оценивания и методическими материалами, определяющими процедуру проведения и оценивания достижения результатов обучения**

**Варианты индивидуального задания:**

**Вариант 1**

1. Используя базы данных найти структурную информацию о CsCl, включая координаты атомов, параметры ячеек и пространственную группу.
2. Рассчитать положения первых 7 структурных пиков для CsCl для монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  А.
3. Рассчитать структурные факторы для CsCl для монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  А.

<sup>1</sup> Семестры указываются по порядку, для каждого индикатора

<sup>2</sup> Указываются результаты обучения по дисциплине (модулю), практике, соотнесенные с индикатором достижения компетенции.

<sup>3</sup> Указываются оценочные средства для каждого индикатора.

4. Вычислить интенсивности рассеяния порошком CsCl монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  Å, корректно используя факторы Лоренца и повторяемости рефлексов. Сравнить с экспериментальной нейтронограммой.

### Вариант 2

1. Используя базы данных найти структурную информацию о бериллии (Be), включая координаты атомов, параметры ячеек и пространственную группу.

2. Вычислить координаты всех атомов в ячейке при помощи EQUIV.

3. Рассчитать положения первых 7 структурных пиков для Be для монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  Å.

4. Рассчитать структурные факторы для Be для монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  Å.

### Вариант 3

1. Вычислить интенсивности рассеяния порошком Be монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  Å, корректно используя факторы Лоренца и повторяемости рефлексов. Сравнить с экспериментальной нейтронограммой.

2. Рассчитать и построить нейтронограмму  $Ti_{0.676}Zr_{0.324}$ .

3. Выписать законы погасания для элемента симметрии  $2_1$ , располагающегося вдоль оси b кристалла.

4. Выписать законы погасания для пространственной группы Immm.

### Вариант 4

1. Выписать законы погасания для пространственной группы Fm-3m.

2. Установить возможные направления магнитного момента атома, располагающегося на элементе симметрии m и m'.

3. Установить возможные направления магнитного момента атома, располагающегося на элементе симметрии 2 и 2'.

4. Установить список изотропных групп для кристалла  $SrTiO_3$  при фазовом переходе в точке  $k=(0,0,0)$ , по неприводимому представлению GM3+ при помощи ISODISTORT. Установить размерность неприводимого подпространства.

### Вариант 5

1. Установить список изотропных групп для кристалла  $SrTiO_3$  при фазовом переходе в точке  $k=(0,0,0)$ , по неприводимому представлению GM4- при помощи ISODISTORT. Установить размерность неприводимого подпространства.

2. Рассчитать и построить нейтронограмму  $Ti_{0.676}Zr_{0.324}$ .

3. Рассчитать структурные факторы для CsCl для монохроматического нейтронного излучения  $\lambda=1.4724$  А.

4. Вычислить координаты всех атомов в ячейке при помощи EQUIV.

### **Методические рекомендации по выполнению индивидуального задания:**

Текущий контроль осуществляется индивидуальным заданием, которое состоит из четырех задач, которые нужно сдать в течение семестра. Допускается сдача индивидуальных задач частями, по мере выполнения. При выполнении задания можно консультироваться у преподавателя.

### **Критерии оценки выполнения индивидуального задания:**

Оценка «отлично» выставляется студенту, если решены не менее 90% задач индивидуального задания, последовательность изложения решения логически стройная и дополнена комментариями, но при этом могут быть допущены несущественные ошибки.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если решены не менее 75% задач индивидуального задания, последовательность изложения решения логически стройная, не допускается существенных неточностей, правильно применяются теоретические положения.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если решены не менее 50% задач индивидуального задания, при этом может быть нарушена логическая последовательность изложения решения, допускаются неточности и недостаточно правильные формулировки.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если решены менее 50% задач контрольного задания, допущены существенные ошибки.

### **Контрольные вопросы к зачету**

1. Источники нейтронов и рассеяние нейтронов кристаллами. Реакторы со стационарным потоком. Импульсные реакторы. Другие импульсные источники.
2. Рассеяние нейтронов ядрами. Упругое рассеяние нейтронов кристаллами. Кристаллографические аспекты рассеяния нейтронов.
3. Факторы, определяющие интенсивность дифракционных отражений. Геометрические аспекты измерения интегральной интенсивности отражений. Методы сканирования обратного пространства. Переход от интегральных интенсивностей к структурным факторам.
4. Поглощение нейтронов. Вторичная экстинкция. Аномальное рассеяние. Многократное рассеяние. Температурный фактор. Фактор интегральности (множитель Лоренца). Фактор повторяемости.
5. Дифракционные исследования на установках с постоянной длиной волны. Монохроматизация и коллимация первичного пучка нейтронов. Аппаратура и техника нейтронографических измерений.

6. Некоторые вопросы обработки нейтронограмм поликристаллических образцов. Метод Ритвельда.
7. Дифракционные исследования на установках с непрерывным спектром нейтронов. Метод белого пучка.
8. Метод времени пролета. Стохастические прерыватели.
9. Симметрия магнитоупорядоченных кристаллов. Пространственные группы кристаллов. Неприводимые представления пространственных групп. Шубниковские группы магнитоупорядоченных кристаллов. Представления шубниковских групп.
10. Способы классификации магнитных структур. Недостаточность описания симметрии магнетиков с помощью шубниковских групп. Цветная магнитная симметрия.
11. Приводимые представления пространственной группы на базисе локализованных атомных функций. Базисные функции неприводимых представлений пространственных групп.
12. Концепция фазовых переходов в описании магнитных структур. Построение магнитных структур из базисных функций. Примеры симметрией анализа магнитных структур.
13. Длиннопериодические магнитные структуры в гексагональных редкоземельных металлах.
14. Рассеяние нейтронов магнитоупорядоченным кристаллом. Возможные типы магнитных решеток. Определение канала перехода или звезды волнового вектора из системы магнитных рефлексов.
15. Определение магнитной структуры — второй этап нейтронографического исследования.
16. Рассеяние поляризованных нейтронов на магнитных структурах.
17. Роль доменной структуры при нейтронографическом исследовании магнетиков.
18. Магнитное рассеяние нейтронов в структурно искаженных кристаллах. Атомный форм-фактор магнитного рассеяния.
19. Методы выделения магнитной составляющей при рассеянии нейтронов.
20. Факторы, влияющие на интенсивность.

#### **Методические рекомендации по проведению зачета:**

Промежуточный контроль осуществляется зачетом, цель которого проверить знания обучающихся. Форма проведения зачета - устный опрос по билетам. В билет включаются два теоретических вопроса из разных разделов программы.

### Критерии оценивания знаний студентов на зачете:

Шкала оценивания	
незачет	зачет
Студент обнаруживает существенные пробелы в знаниях основного учебного материала по дисциплине. Уровень знаний ниже минимальных требований.	Студент демонстрирует систематический характер знаний по дисциплине. При изложении материала допущено несколько несущественных погрешностей. Студент испытывает незначительные трудности в ответах на дополнительные вопросы.

Разработчик



М.С.Молокеев