

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор института nano-, био-,  
информационных, когнитивных  
и социогуманитарных наук и  
технологий**

**Т.Е. Григорьев**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

<b>по дисциплине:</b>	Методы синхротронных и нейтронных исследований гибридных и полимерных материалов
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра nano-, био-, информационных и когнитивных технологий
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Зачет

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: М.А. Щербина, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры nano-, био-, информационных и когнитивных технологий  
16.12.2021

## **Аннотация**

Программа курса имеет своей целью ознакомление со свойствами синхротронного (СИ) излучения, с разными типами источников СИ и механизмами генерации СИ, с синхротронными методами исследований и конструкциями экспериментальных станций, с примерами применения синхротронного излучения в фундаментальных и прикладных исследованиях, с перспективами развития синхротронных исследований и исследовательской инфраструктуры в России и в мире.

Важнейшей составляющей исследовательской инфраструктуры с точки зрения научно-технологического развития страны являются источники синхротронного излучения. Методы исследования, основанные на использовании синхротронного излучения, становясь сегодня основным неразрушающим инструментом для получения уникальных данных о структуре и свойствах веществ на уровне отдельных атомов, находят применение при проведении фундаментальных исследований и разработке передовых технологий для всех отраслей экономики - от материаловедения и структурной химии до наук о жизни, медицинских, био- и природоподобных технологий.

Исследования атомарной структуры объектов живой природы позволяют создать на основе полученных знаний принципиально новые технологии, копирующие принципы функционирования природных систем. Именно такие технологии должны лечь в основу новой технологической базы экономики страны. Использование такого подхода позволит создать революционные, прорывные технологии в медицине, фармакологии, сельском хозяйстве, микробиологической и пищевой промышленности, энергетике, IT-области. Развитие существующих производственных технологий и создание на их основе конкурентоспособных высокотехнологичных производств

в таких отраслях экономики, как электроника, химическая, фармацевтическая и аэрокосмическая промышленность, машиностроение, судостроение, эффективная добыча и глубокая переработка полезных ископаемых, ядерная энергетика, ядерная медицина и других, требуют получения при проведении синхротронных исследований серьезных научных и научно-технических результатов. Современные технологии требуют увеличения точности контроля качества ключевых узлов и деталей создаваемой продукции, совершенствования технологических процессов, что может быть обеспечено только с применением синхротронного и нейтронного излучения, составляющих сегодня метрологическую основу развития науки. С использованием методов, основанных на использовании синхротронного излучения, стало возможно с атомарной точностью определять структуру и состав изготавливаемых деталей, совершенствовать химический состав и свойства материалов, реагентов, катализаторов, смазок, топлив. Значимым фактором для формирования фундаментального задела в области разработки технологий, основанных на использовании свойств живых систем, органических и гибридных материалов, и для контроля качества и развития существующих промышленных технологий является возможность изучения динамики процессов с минимальным временным разрешением. Наблюдение динамики физических, химических или биологических процессов открывает возможность для их воспроизводства и управления ими с целью достижения необходимого результата. Знания о механизмах и причинах процессов позволяют конструировать системы и материалы с контролируемыми параметрами.

## **1. Цели и задачи**

### **Цель дисциплины**

- формирование у студентов цельных систематических знаний студента о структуре, свойствах, фазовом поведении частично упорядоченных системах и их роли в современных материаловедении, включая медицинские, биофизические приложения, органическую электронику и фотонику, а также о применении синхротронного излучения в фундаментальных и прикладных исследованиях.

### **Задачи дисциплины**

- формирование базовых знаний о видах, структуре и фазовом поведении частично упорядоченных систем и их практическом применении
- формирование базовых знаний о структурных методах исследования частично упорядоченных систем, аппаратных способах их реализации, получаемых с помощью них результаты в интересах фундаментальной и прикладной науки, перспективах развития синхротронных исследований и исследовательской инфраструктуры в России и в мире.

## **2. Перечень формируемых компетенций**

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-5 Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия	УК-5.1 Способен выявлять специфику философских и научных традиций основных мировых культур
	УК-5.2 Способен определять теоретическое и практическое значение культурно-языкового фактора при взаимодействии различных философских и научных традиций
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.2 Владеет навыком руководства малым коллективом в сфере своей профессиональной деятельности
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные виды частично упорядоченных систем;
- свойства различных видов частично упорядоченных систем;
- порядки численных величин, характерные для физических свойств частично упорядоченных систем;
- основные методы применения рентгеноструктурного анализа к исследованию структуры и свойств частично упорядоченных систем, а также структурные характеристики, которые могут быть определены с помощью этих методов;
- теоретические принципы, лежащие в основе применяемых методов рентгеноструктурного анализа.

уметь:

- оценивать структурные и макроскопические свойства частично упорядоченных систем, применять физические теории к их описанию;
- выбирать оптимальные методики рентгеноструктурного анализа для определения структуры и свойств частично упорядоченных систем, успешно их применять;
- эффективно использовать современные информационные технологии и ресурсы для получения необходимых знаний по интересующей научной проблеме в рамках рентгеноструктурного анализа частично упорядоченных систем.

владеть:

- специальной терминологией в области рентгеноструктурного анализа, в том числе рентгеноструктурного анализа частично упорядоченных фаз;
- основными методами применения рентгеноструктурного анализа и обработки данных, полученных в результате рентгеновского эксперимента;
- методиками построения моделей к описанию свойств частично упорядоченных систем.

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

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение. Общая теория рентгеновской дифракции. Основные понятия теории групп и структурного анализа вещества.	2	1		4
2	Частично упорядоченные системы. Пластические кристаллы, ротационно-кристаллическая мезофаза.	2			1
3	Soft-Matter. Формирование частично упорядоченных мезофаз в термотропных и лиотропных системах.	2			1
4	Метод реконструкции электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рефлексов.	2	3		1
5	Апериодические кристаллы. Общая теория покрытий.	2			1
6	Несовместные кристаллы.	2			1
7	Белковые кристаллы. Роль водородных связей в формировании белковых кристаллов.	2			5
8	Молекулярное моделирование. Общая теория.	2	5		2
9	Программные комплексы молекулярного моделирования. Accelrys Materials Studio.	2			5
10	Теория рассеяния неупорядоченными ансамблями частиц.	2			5
11	Программный комплекс ATSAS для реконструкции формы частиц в неупорядоченных ансамблях частиц.	2	5		1
12	Синхротронно-нейтронная визуализация.	2			5
13	Смектики, их классификация и практическое применение.	2			5
14	Тонкопленочные материалы. Общая теория рентгеновской рефлектометрии. Рентгеновская рефлектометрия органических систем.	2	1		5

15	Метод стоячих волн. Неорганические тонкопленочные материалы. Рентгеновская спектрометрия и ее практические применения.	2			3
Итого часов		30	15		45
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

##### Семестр: 1 (Осенний)

1. Введение. Общая теория рентгеновской дифракции. Основные понятия теории групп и структурного анализа вещества.

Рассеяние электромагнитной волны на одиночном электроны и на электронном поле. Понятие кристаллической решетки. Обратное пространство. Открытые и закрытые операции симметрии. Точечные группы симметрии. Плоские и пространственные группы симметрии.

2. Частично упорядоченные системы. Пластические кристаллы, ротационно-кристаллическая мезофаза.

Понятие частично упорядоченной системы. Пластические кристаллы. Физические свойства пластических кристаллов. Кристаллизация дендримеров как пример формирования пластического кристалла. Ротационно-кристаллические и *condis*-фазы. Типы полимеров, формирующие ротационно-кристаллические мезофазы. Понятие мезогенной группы. Примеры мезогенных групп. Жесткие секторообразные и конусообразные мезогенные группы. Дискотики. Двумерные колончатые мезофазы, формируемые дискотическими и жесткими секторообразными группами. кристалла. Ротационно-кристаллические и *condis*-фазы. Типы полимеров, формирующие ротационно-кристаллические мезофазы.

3. Soft-Matter. Формирование частично упорядоченных мезофаз в термотропных и лиотропных системах.

Понятия самосборки и самоорганизации. Блок-сополимеры, как пример термотропных самоорганизующихся систем. Фазовая диаграмма блок-сополимеров в предельных случаях слабой и сильной сегрегации. Термодинамика литропных самоорганизующихся систем, критическая точка мицеллообразования.

4. Метод реконструкции электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рефлексов.

Общая теория реконструкции электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рефлексов (РЭП). Фазовая проблема и методы ее решения. Метод минимизации четвертого момента электронной плотности. Метод гистограмм электронной плотности. Примеры применения метода РЭП в одномерном, двумерном и трехмерном случаях

5. Аперидические кристаллы. Общая теория покрытий.

Понятие аперидического кристалла. Теория дифракции рентгеновского излучения на аперидических кристаллах. Теория покрытий и упаковок. Решетки Пенроуза. Применение теории множественной раскраски к колончатым фазам, сформированным полифильными биологическими молекулами.

## 6. Несовместные кристаллы.

Понятие несовместного кристалла. Классификация несовместных кристаллов. Цепи Маркова, теория дифракции рентгеновского излучения на несовместных кристаллах.

## 7. Белковые кристаллы. Роль водородных связей в формировании белковых кристаллов.

Роль белковой кристаллографии в биофизике и биохимии. Роль водородных связей в биохимии. Слабые, средние и сильные водородные связи. Альфа-спирали и бета-пластины. Выращивание белковых кристаллов. Аппаратурная реализация эксперимента в белковой кристаллографии. Особенности структурного эксперимента в белковой кристаллографии. Варианты решения фазовой проблемы непрямыми методами. Радиационное повреждение.

## 8. Молекулярное моделирование. Общая теория.

Общая концепция молекулярного моделирования. Общая теория молекулярного моделирования. Понятие потенциала в молекулярном моделировании, важность выбора и тонкой настройки потенциала. Виды статистических ансамблей в молекулярном моделировании. Минимизация энергии отдельной молекулы и системы в целом.

## 9. Программные комплексы молекулярного моделирования. Accelrys Materials Studio.

Общие задачи, предъявляемые к комплексам молекулярного моделирования. HyperChem как пример базового комплекса молекулярного моделирования. Accelrys Materials Studio – решение общих задач молекулярного моделирования. Блок рентгеноструктурного анализа в комплексе Accelrys Materials Studio.

## 10. Теория рассеяния неупорядоченными ансамблями частиц.

Общая теория рентгеновского рассеяния неупорядоченными ансамблями частиц. Задача восстановления формы частицы из рентгеновского рассеяния ансамблем, как пример математически некорректной задачи. Неоднозначность восстановления формы частицы и методы ее преодоления.

## 11. Программный комплекс ATSAS для реконструкции формы частиц в неупорядоченных ансамблях частиц.

Модули и архитектура программного комплекса ATSAS, организация работы по pipe-принципу. Алгоритм обработки экспериментальных кривых, выбор алгоритмического пути в зависимости от поставленной задачи и качества данных. Практические примеры применения программного комплекса ATSAS. Применение нейтронного рассеяния в биологическом эксперименте.

## 12. Синхротронно-нейтронная визуализация.

Основы синхротронной радиографии и томографии. Основные способы вариации контраста, включая применение тепловых нейтронов. Принцип восстановления трехмерных изображений по проекциям. Применение методов визуализации для изучения культурного и природного наследия.

## 13. Сметтики, их классификация и практическое применение.

Классификация смектических мезофаз. Зависимость фазового поведения смектика от химического строения его молекулы. Практическое применение смектиков в биологии и электронике.

## 14. Тонкопленочные материалы. Общая теория рентгеновской рефлектометрии. Рентгеновская рефлектометрия органических систем.

Применение классической теории Максвелла к взаимодействию рентгеновского излучения с интерфейсом. Скользящие углы отражения. Аппаратурная реализация метода рентгеновской рефлектометрии. Шероховатые поверхности. Восстановление электронной плотности в направлении директора к пленке, метод Паррата.

Зависимость свойств тонкой пленки от методов ее получения. Метод Ленгмюра-Блоджетт. Аппаратурная реализация методов рентгеновской рефлектометрии и малоуглового рентгеновского рассеяния непосредственно с интерфейса воздух-растворитель. Примеры исследования тонкопленочных материалов различной природы.

15. Метод стоячих волн. Неорганические тонкопленочные материалы. Рентгеновская спектроскопия и ее практические применения.

Общая теория метода стоячих рентгеновских волн. Аппаратурная реализация метода стоячих рентгеновских волн и его ограничения. Применение метода стоячих рентгеновских волн к исследованию структуры тонкопленочных материалов.

Общее представление о методах рентгеновской спектроскопии и их аппаратурной реализации. Применение методов рентгеновской спектроскопии к исследованию структуры материалов.

## **5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

учебная аудитория, ноутбук, проектор, меловая доска, мел.

## **6. Перечень рекомендуемой литературы**

### Основная литература

Фонд литературы кафедры

2. Зубавичус Я.В., Мухамеджанов Э.Х., Сенин Р.А. Экспериментальные станции КИСИ. Журнал "Природа", № 12, 2013 ([http://nrcki.ru/files/Stations\\_of\\_KESE.pdf](http://nrcki.ru/files/Stations_of_KESE.pdf)).

3. Кулипанов Г.Н., Скринский А.Н. Использование синхротронного излучения: состояние и перспективы. УФН, том 122, вып. 3. стр.369-418, 1977.

Фонд литературы кафедры

5. Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры вещества. – М: Физматлит, 2007.

6. Аксенов В.Л., Балагуров А.М. Времяпролетная нейтронная дифрактометрия. УФН, том 166, вып. 9, 1996.

7. Ковальчук М.В., Квардаков В.В., Корчуганов В.Н. КИСИ вчера, сегодня, завтра. Журнал "Природа", № 12, 2013 (<http://nrcki.ru/files/KSRS25-36.pdf>).

8. Ковальчук М.В., Наука и жизнь: Моя конвергенция, Избранные научные труды. Т. 2. – М.: ИКЦ Академкнига, 2011.

9. Г.Н. Жижин и др., Лазеры на свободных электронах и перспективы применения их излучения в оптической спектроскопии, Вестник РУДН. Серия Физика, №10(1), 100-108 (2002).

### Дополнительная литература

1. Боуэн Д.К, Таннер Б.К. Высокора разрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. – С.-Пб.: Наука, 2002.
2. Суворов Э.В. Физические основы современных методов исследования реальной структуры кристаллов. Учебное пособие, Черноголовка, 1999.
3. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. – М.: Иностранная литература, 1950.

Фонд литературы кафедры

4. Гинье А. Рентгенография кристаллов, теория и практика. – М.: Иностранная литература, 1961.
5. Рентгенотехника: Справочник, в 2-х кн. / под ред. В.В. Ключева. – М.: Машиностроение, 1992.
6. X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction. Theory and Applications. / Ed. by Andre Authier. – NY and London: Plenum Press, 1996.
7. Под. Ред. М.В. Ковальчука, Стоячая рентгеновская волна. Сборник научно-популярных статей, М.: НИЦ “Курчатовский институт”, 2013.
8. В. В. Лидер, М. В. Ковальчук, Методы рентгеновского фазового контраста, Кристаллография, том 58, No 6, с. 764–784, (2013).

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

1. <http://www.ipmt-hpm.ac.ru/labs/xray/ru/main.html>
2. <http://www.lightsources.org/cms/?pid=1000098>
3. <http://www.lightsources.org/cms/?pid=1000103>
4. <http://www.xfel.eu/>
5. <http://nrd.pnpi.spb.ru/reaktorPIK/pik.html>

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

1. <http://www.ipmt-hpm.ac.ru/labs/xray/ru/main.html>"
2. <http://www.lightsources.org/cms/?pid=1000098>"
3. <http://www.lightsources.org/cms/?pid=1000103>"
4. <http://www.xfel.eu/>"
5. <http://nrd.pnpi.spb.ru/reaktorPIK/pik.html>"

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Для успешного освоения курса, помимо посещения лекций, от студентов требуется самостоятельная работа в объеме не менее чем те часы, которые указаны для каждого раздела программы. В основном, это время отводится на самостоятельное повторение материала лекций, чтения рекомендованной литературы и подготовку к промежуточным тестированиям, которые проводятся для текущего контроля за усвоением материала. Всего предполагается провести за семестр одну промежуточную контрольную, а также ряд проверочных работ.



## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра nano, био, информационных и когнитивных технологий
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Зачет	
<b>Разработчик:</b>	М.А. Щербина, канд. физ.-мат. наук, доцент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-5 Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия	УК-5.1 Способен выявлять специфику философских и научных традиций основных мировых культур
	УК-5.2 Способен определять теоретическое и практическое значение культурно-языкового фактора при взаимодействии различных философских и научных традиций
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.2 Владеет навыком руководства малым коллективом в сфере своей профессиональной деятельности
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы синхротронных и нейтронных исследований гибридных и полимерных материалов» обучающийся должен:

### знать:

- основные виды частично упорядоченных систем;
- свойства различных видов частично упорядоченных систем;
- порядки численных величин, характерные для физических свойств частично упорядоченных систем;
- основные методы применения рентгеноструктурного анализа к исследованию структуры и свойств частично упорядоченных систем, а также структурные характеристики, которые могут быть определены с помощью этих методов;
- теоретические принципы, лежащие в основе применяемых методов рентгеноструктурного анализа.

### уметь:

- оценивать структурные и макроскопические свойства частично упорядоченных систем, применять физические теории к их описанию;
- выбирать оптимальные методики рентгеноструктурного анализа для определения структуры и свойств частично упорядоченных систем, успешно их применять;
- эффективно использовать современные информационные технологии и ресурсы для получения необходимых знаний по интересующей научной проблеме в рамках рентгеноструктурного анализа частично упорядоченных систем.

**владеть:**

- специальной терминологией в области рентгеноструктурного анализа, в том числе рентгеноструктурного анализа частично упорядоченных фаз;
- основными методами применения рентгеноструктурного анализа и обработки данных, полученных в результате рентгеновского эксперимента;
- методиками построения моделей к описанию свойств частично упорядоченных систем.

### **3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю**

В целях текущего контроля успеваемости предусмотрен краткий опрос по темам предыдущих занятий по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

### 3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Промежуточная аттестация по дисциплине «Методы синхротронных и нейтронных исследований гибридных и полимерных материалов» осуществляется в форме зачета. Зачет проводится в устной форме.

### Перечень контрольных вопросов:

1. Введение. Общая теория рентгеновской дифракции. Основные понятия теории групп и структурного анализа вещества.
2. Частично упорядоченные системы. Пластические кристаллы, ротационно-кристаллическая мезофаза.
3. Soft-Matter. Формирование частично упорядоченных мезофаз в термотропных и лиотропных системах.
4. Метод реконструкции электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рефлексов.
5. Аперидические кристаллы. Общая теория покрытий.
6. Несовместные кристаллы.
7. Белковые кристаллы. Роль водородных связей в формировании белковых кристаллов.
8. Молекулярное моделирование. Общая теория.
9. Программные комплексы молекулярного моделирования. Accelrys Materials Studio.
10. Теория рассеяния неупорядоченными ансамблями частиц.
11. Программный комплекс ATSAS для реконструкции формы частиц в неупорядоченных ансамблях частиц.
12. Синхротронно-нейтронная визуализация.
13. Смектики, их классификация и практическое применение.
14. Тонкопленочные материалы. Общая теория рентгеновской рефлектометрии.
15. Метод стоячих волн. Неорганические тонкопленочные материалы.

### Примеры тестовых заданий:

1. Угловая расходимость излучения из ондулятора в плоскости колебаний частиц ( $\Theta=$ ):  
А)  $1/\gamma$  В)  $1/E$   
Б)  $K/\gamma$  Г)  $1/\lambda_u$
2. «Розовый» пучок можно получить при помощи (выберите верные ответы):  
А) монохроматора В) зеркал полного внешнего отражения  
Б) трансфокатора Г) многослойных зеркал
3. Как выбирать монохроматор для проведения высокоразрешающих дифракционных исследований в бездисперсионной схеме?  
А) Монохроматор должен обеспечить максимальное отражение первичного пучка В) Использование монохроматора не обязательно, достаточно использовать рентгеновские зеркала  
Б) Монохроматор должен быть идентичен исследуемому образцу Г) Монохроматор может быть любым, поскольку его главная задача - обеспечить

монохроматизированный рентгеновский пучок

4. Какое принято обозначения для электронной оболочки с главным квантовым числом  $n=2$  и орбитальным числом  $l=1$ ?
- А) К  
Б) L2, L3  
В) L  
Г) L1, L2, L3
5. При каких агрегатных состояниях вещества возможно проводить измерение рентгеновских спектров поглощения?
- А) При любых  
Б) Обязательно наличие кристаллической решетки, не зависимо от агрегатного состояния  
В) Только в твердом состоянии  
Г) Жидком и твердом
6. Какие структурные параметры напрямую влияют на интенсивность пиков в спектре EXAFS?
- А) Тип соседних к поглощающему атомов  
Б) Межатомные расстояния  
В) Количество соседних атомов  
Г) Параметр Дебая-Валлера
7. Как изменится положение фотоэлектронного пика кремния Si2p при окислении кремния до SiO<sub>2</sub>?
- А) Сдвинется в сторону меньших энергий  
Б) Сдвинется в сторону больших энергий  
В) Положение пика не изменится  
Г) Пик разделится на 2 отдельно стоящих пика
8. Что является источником контраста в рентгеновской визуализации?
- А) Плотность вещества  
Б) Толщина образца  
В) Показатель преломления  
Г) Все перечисленное
9. На топограмме видна линия. Что это?
- А) Дислокация  
Б) Царапина поверхности  
В) Все перечисленное
10. Выберите пространственные группы, в которых может закристаллизоваться белок:
- А) P4<sub>2</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>  
Б) R-3  
В) Pbc<sub>a</sub>  
Г) F23  
Д) Cc  
Е) I-4m2
11. Какие задачи нельзя решить порошковой дифракцией?
- А) Решение структуры соединения  
Б) Получение информации об атомах, являющихся соседями в периодической таблице

Б) Определение локального окружения конкретного атома      Г) Получение распределения кристаллитов по размерам

12. Какую функцию выполняет второй блок щелей в трехщелевой схеме коллимации?

А) Ограничение размеров пучка      В) Уменьшение эффекта рассеяния на предыдущих оптических элементах

Б) Защита от радиационных повреждений образца      Г) Все вышеперечисленное

13. Чем полидисперсная система в растворе отличается от монодисперсной?

А) Состоит из нескольких молекул      В) Состоит из атомов различного типа

Б) Состоит из молекул различного типа      Г) Изменяет свое состояние с течением времени

14. Какой метод не подходит для снижения влияния радиационных повреждений на итоговую картину МУРР?

А) Создание постоянного протока образца      В) Уменьшение времени экспозиции через область воздействия пучком

Б) Уменьшение интенсивности пучка      Г) Уменьшение количества образца

15. Асимптотическое поведение МУРР для плоской частицы имеет вид  $I \sim 1/q^P$ , где P равно:

А) 1      В) 3

Б) 2      Г) 4

16. Глубина выхода флуоресцентного излучения от примесных атомов в образце определяется:

А) энергией падающего на образец излучения      В) типом химической связи

Б) энергией флуоресцентного излучения      Г) типом кристаллической решетки

17. Излучение от двух источников называется когерентным, если:

А) оно монохроматично и имеет одну длину волны      В) среднее произведение амплитуд волн отлично от нуля

Б) разность фаз не зависит от времени      Г) наблюдается интерференционная картина в интенсивности излучения

#### Примеры задач:

- 1) Рассчитать радиус поворота частицы с заданной энергией в магнитном поле диполя. (Например,  $E=3$  гэВ,  $B=0.68$  Тл.).
- 2) Рассчитайте максимальный полный поток фотонов гамма излучения попадающих в детектор если, сечение пучка на матрице детектора составляет  $7 \times 0.5$  мм, применяются 2D детектор с пикселем  $55 \times 55$  мкм, максимальный поток фотонов в пиксель составляет  $10^6$  фот/сек.

- 3) Дана угловая зависимость интенсивности дифракционного отражения, содержащая два дифракционных пика - от слоя и подложки, а также набор осцилляций. Определить параметр кристаллической решетки слоя и его толщину, если известно, что он выращен на подложке кремния ориентации (001). При исследовании использовалось излучение с длиной волны 1 Ангстрем.
- 4) Длина поглощения рентгеновского излучения с энергией 10000 эВ в фольге молибдена составляет 11.4 мкм. Какая часть излучения поглощается в фольге молибдена толщиной 22.4 мкм?
- 5) Расчет максимальной длины волны для возбуждения 1s состояния углерода.
- 6) На каких энергиях рентгеновского излучения можно получить разностное изображения иодсодержащего вещества?
- 7) Часть кристалла отражает к меньшим значениям брэгговского угла. Как определить, это разориентация или увеличенный период решетки?
- 8) Какая выйдет группа, если для кристалла с пространственной группой **Pscn** сделать переобозначение базисных векторов так, что вектора **b**, **c**, **a** старого базиса соответствуют векторам **a**, **b**, **c** нового.
- 9) Определите параметр решетки кубического кристалла, если при измерении дифракционной картине на длине волны  $\lambda=1 \text{ \AA}$ , пик с индексами Миллера (4 3 0) расположен на угле рассеяния  $2\theta=60^\circ$ .
- 10) Выведите формулу для форм-фактора полый сферы с внешним радиусом R1 и внутренним радиусом R2.
- 11) Расчет значения критического угла полного внешнего отражения материала при заданных параметрах: плотность материала и длина волны излучения.
- 12) Выведите формулу для когерентного потока при данной спектральной яркости источника, если длина поперечной когерентности связана с размером источника w соотношением  $\xi = \lambda R/w$  по вертикали и по горизонтали.

**Примеры билетов** (заданий, тестов и др. материалов, используемых для проведения зачета):

#### Билет № 1

1. Синхротронно-нейтронная визуализация.
2. Аперидические кристаллы. Общая теория покрытий.

#### Билет № 2

1. Несовместные кристаллы. Как выглядит спектр поворотного магнита? Как изменится спектр при изменении энергии ускорителя, поля в магните?
2. Изменение электронной структуры при переходе от атома к молекуле и твердому телу.

## 4. Критерии оценивания

1. Оценка «зачтено» выставляется студенту, который
  - прочно усвоил предусмотренный программный материал;
  - правильно, аргументировано ответил на все вопросы, с приведением примеров;
  - показал глубокие систематизированные знания, владеет приемами рассуждения и сопоставляет материал из разных источников: теорию связывает с практикой, другими темами данного курса, других изучаемых предметов
2. Оценка «не зачтено» Выставляется студенту, который не справился с 50% вопросов билета, в ответах на другие вопросы допустил существенные ошибки. Не может ответить

на дополнительные вопросы, предложенные преподавателем, не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении зачета обучающемуся предоставляется 40 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на зачете не должен превышать двух астрономических часов. Во время проведения зачета обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, конспектами лекций, а также любой справочной литературой.