

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол № 6 от 31.05.2023 г.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные технологии в кристаллографии

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Направление подготовки / специальность

03.03.02 - Физика

Направленность образовательной программы

Физика конденсированного состояния

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.1.ДВ.03.02.06 Компьютерные технологии в кристаллографии относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-2: Способен применять профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных дисциплин, в научно-исследовательской деятельности, при реализации научно-исследовательских, научно-инновационных и практических проектов	ИД ПК-2: Демонстрация способности применять профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных дисциплин, в научно-исследовательской деятельности, при реализации научно-исследовательских, научно-инновационных и практических проектов	ИД ПК-2: Знает базовые основные понятия и теоремы кристаллографии; базовые законы физики рентгеновских лучей; принципы генерирования и детектирования рентгеновских лучей. Умеет строить сферические, стереографические и гномостереографические проекции различных геометрических объектов; рассчитывать дифракционные картины рассеяния рентгеновских лучей на кристаллических структурах; работать с компьютерными банками кристаллических структур. Владеет теорией точечной и пространственной симметрии; теорией взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллическими средами.	Задачи	Зачёт: Контрольные вопросы

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	2

Часов по учебному плану	72
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	0
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	1
самостоятельная работа	39
Промежуточная аттестация	0 Зачёт

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
Банк структур неорганических кристаллов	8		4	4	4
Банк структур органических кристаллов	8		4	4	4
Стереографические проекции	7		3	3	4
Точечные группы симметрии	7		3	3	4
Простые формы кристаллов	7		3	3	4
Псевдосимметрия атомных структур кристаллов	7		3	3	4
Гномостереографические проекции лауэграмм монокристаллов	9		4	4	5
Дифракция рентгеновских лучей на одномерных структурах	9		4	4	5
Дифракция рентгеновских лучей на атомных кластерах	9		4	4	5
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	72	0	32	33	39

Содержание разделов и тем дисциплины

Список лабораторных работ.

1. Банк структур неорганических кристаллов.
2. Кембриджский банк структур неорганических кристаллов.
3. Стереографическая проекция.

4. Точечные группы симметрии.
5. Простые формы кристаллов.
6. Псевдосимметрия атомных структур кристаллов.
7. Построение гномостереографических проекций лауэграмм монокристаллов на компьютере.
8. Дифракция рентгеновских лучей на одномерных кристаллах, квазикристаллах и аморфизованных структурах.
9. Дифракция рентгеновских лучей на атомных кластерах.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Самостоятельная работа студентов предусматривает теоретическую подготовку к выполнению лабораторных работ, выполнение домашних заданий, изучение рекомендованной литературы и подготовку к зачету.

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-2:

1. Построить стереографические проекции точки, прямой линии и плоскости.
2. Рассчитать угол между направлениями, заданными сферическими координатами.
3. Построить стереографическую проекцию большого круга по заданному полюсу.
4. Построить стереографическую проекцию заданной точечной кристаллографической группы.
5. Построить гномостереографическую проекцию заданной комбинации простых форм.
6. Перечислить все подгруппы заданной точечной кристаллографической группы.
7. Вычислить брэгговский угол при заданном межплоскостном расстоянии и данной длине волны рентгеновского излучения.
8. Рассчитать дифракционную картину для одномерной ограниченной периодической структуры рассеивающих центров.
9. Записать выражение для зависимости интенсивности рентгеновского излучения, рассеянного заданным атомным кластером.
10. Рассчитать дебаеграмму для данной кубической кристаллической структуры

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	успешное выполнение практических заданий, выданных преподавателем
не зачтено	невыполнение практических заданий, выданных преподавателем,

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатор достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено			зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельным и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

	ответа		и недочетами	недочетами		недочетов	
--	--------	--	-----------------	------------	--	-----------	--

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-2

1. Что такое стереографическая и гномостереографическая проекция?
2. Перечислить точечные кристаллографические группы.
3. Записать матрицу заданной операции точечной симметрии.
4. Чем отличаются общие простые формы от частных?
5. Назвать основные процессы взаимодействия рентгеновских лучей с веществом.
6. Что такое рентгеновская дифракция Фраунгофера?
7. Изложить схему формирования главных и побочных максимумов на дифрактограмме.
8. Объяснить различие геометрии Лауэ и Брэгга при регистрации рентгеновской дифракции.
9. Что такое псевдосимметрия кристаллической структуры?

10. Что такое квазикристалл?

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить точки активного роста нового знания, успешное выполнение практических заданий, выданных преподавателем
не зачтено	полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации, невыполнение практических заданий, выданных преподавателем

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Кристаллография : лабораторный практикум : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальностям физика и физика конденсир. состояния вещества... / под ред. Е. В. Чупрунова. - М. : Физматлит, 2005. - 412 с. - ISBN 5-94052-103-7 : 140.25., 49 экз.

Дополнительная литература:

1. Чупрунов Евгений Владимирович. Основы кристаллографии : учеб. для вузов. - М. : Физматлит, 2004. - 500 с. - ISBN 5-94052-060-1 : 143.00., 86 экз.

2. Иверонова Валентина Ивановна. Теория рассеяния рентгеновских лучей : [учеб. пособие для физ. специальностей вузов]. - 2-е изд., доп. и перераб. - М. : Изд-во МГУ, 1978. - 277 с. : ил. - 0.95., 3 экз.

3. Задачи по кристаллографии : учеб. пособие для вузов по физ. и хим. специальностям / [под ред. Е. В. Чупрунова, А. Ф. Хохлова]. - М. : Физматлит, 2003. - 208 с. - ISBN 5-94052-066-3 : 44.00., 196 экз.

4. Фаддеев Михаил Андреевич. Физика атомов и молекул : учеб. пособие / ННГУ. - Н. Новгород : Изд-во Нижегород. ун-та, 2007. - 313 с. - В надзаг.: Приоритетный национальный проект "Образование". Инновационная образовательная программа Нижегородского университета.... - ISBN 978-5-85746-974-3 : 150.00., 30 экз.

5. Волынский Борис Алексеевич. Сферическая тригонометрия / под ред. Д. Н. Пономарева. - М. : Наука, 1977. - 135 с. : ил. - 0.20., 1 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Для каждой лабораторной работы имеются оригинальные программные продукты, размещенные на сайте физического факультета ННГУ.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной

программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами.

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

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки/специальности 03.03.02 - Физика.

Автор(ы): Фаддеев Михаил Андреевич, кандидат физико-математических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Чупрунов Евгений Владимирович, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 20.05.2022, протокол № б/н.