

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

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

УТВЕРЖДЕНО
решением
Ученого совета ННГУ
протокол от
«_____» _____ 202_ г. № _____

Рабочая программа дисциплины

Введение в структурный анализ твердого тела

(наименование дисциплины (модуля))

Уровень высшего образования

магистратура

(бакалавриат / магистратура / специалитет)

Направление подготовки / специальность

03.04.02 Физика

(указывается код и наименование направления подготовки / специальности)

Направленность образовательной программы

магистерская программа "Квантовые и нейроморфные технологии"

(указывается профиль / магистерская программа / специализация)

Квалификация (степень)

магистр

(бакалавр / магистр / специалист)

Форма обучения

очная

(очная / очно-заочная / заочная)

Год начала обучения

2023

(для обучающихся какого года начала обучения разработана Рабочая программа)

Нижний Новгород

1. Место и цели дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Введение в структурный анализ твердого тела» относится к дисциплинам блока ФТД «Факультативы» ООП и осваивается в течение первого семестра второго года обучения в магистратуре. «Введение в структурный анализ твердого тела» формирует у студентов базовые знания об использовании явления дифракции для получения информации об атомной структуре твердых тел. Курс базируется на знаниях студентов, приобретенных в курсах теория колебаний и волн, общая физика, электродинамика, физика твердого тела и др.

Целями освоения дисциплины являются:

- формирование у студентов представления о современной методологии дифракционных методов исследования твердых тел в общую систему знаний студентов;
- формирование у студентов общепрофессиональных и профессиональных компетенций в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 03.04.02 «Физика».

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ПК-3 Способен свободно владеть разделами физики и применять результаты научных исследований в профильных областях для решения научно-практических и научно-технологических задач	<i>З1 (ПК-3) Знать</i> основные дифракционные методы исследования твердых тел; приемы построения обратного пространства для кристаллических объектов различного типа; способы перехода от картины в обратном пространстве к дифракционной картине, регистрируемой прибором; способы анализа основных параметров кристаллической структуры и микроструктуры по дифракционной картине; виды искажений дифракционной картины в случае кристалла с дефектами. <i>У1 (ПК-3) Уметь</i> пользоваться основными подходами для анализа структуры твердых тел; применять полученные знания для решения практических задач, описания физических эффектов в области, соответствующей тематике курса. <i>У2 (ПК-3) Уметь</i> ориентироваться в современной научной литературе по вопросам дифракционного структурного анализа твердых тел. <i>В1 (ПК-3) Владеть</i> навыками решения задач, основанными на полученных в ходе освоения дисциплины знаниях.

3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 1 зачетную единицу, всего 36 часов, из которых 33 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (1 часа – мероприятия промежуточной аттестации; 16 часов занятия лекционного типа, 16 часов занятия семинарского типа (практические занятия), в том числе 2 часа – мероприятия текущего контроля успеваемости), 3 часа составляет самостоятельная работа обучающегося (3 часов самостоятельная работа в течение семестра).

Содержание дисциплины (модуля)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, форма промежуточной аттестации по дисциплине	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	Занятия лабораторного типа	Всего	
<u>Тема 1.</u> Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье	14	4	4		8	6
<u>Тема 2.</u> Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов	14	4	4		8	6
<u>Тема 3.</u> Периодически модулированные структуры	10	2	2		4	6
<u>Тема 4.</u> Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов	10	2	2		4	6
<u>Тема 5.</u> Влияние симметрии кристалла на картину дифракции	8	2	2		4	4
<u>Тема 6.</u> Кристалл с дефектами	14	4	4		8	6
<u>Тема 7.</u> Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра	14	4	4		8	6
<u>Тема 8.</u> Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры	8	2	2		4	4

Тема 9. Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора	8	2	2		4	4
Тема 10. Интенсивность отражения от кристаллической пластинки	8	2	2		4	4
Тема 11. Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда	8	2	2		4	4
Тема 12. Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания	8	2	2		4	4
Контроль самостоятельной работы	2				2	
Итоговая аттестация - зачет						

Текущий контроль успеваемости осуществляется в виде решений и последующей проверки домашних контрольных работ, а также в рамках занятий практического и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций. Промежуточный контроль осуществляется на экзамене.

4. Образовательные технологии

При изучении данного курса используются современные образовательные технологии. Предусматривается широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерное моделирование, разбор конкретных ситуаций, тренинги по решению практических задач) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся.

На занятиях лекционного типа используются мультимедийные средства поддержки образовательного процесса. На занятиях практического типа разбираются решения задач различной степени сложности, проводятся обсуждения рассматриваемых проблем в свете последних научных достижений в данной области. Студенты работают как индивидуально, так и коллективно.

Самостоятельная работа включает в себя выполнение домашних заданий, написание рефератов с предоставлением докладов или кратких сообщений, а также теоретическую подготовку к занятиям по материалам лекций и рекомендованной литературе, приведенной в конце данной программы. Кроме того, студенты имеют возможность принимать участие в семинарах с представителями российских и зарубежных научных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов в области качественно-численного анализа конкретных современных задач физики твердого тела.

Формой итогового контроля знаний студентов по дисциплине является экзамен, в ходе которого оцениваются уровень теоретических знаний и навыки решения практических задач.

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студента – неотъемлемая часть подготовки высококвалифицированного специалиста в соответствующей области. Ее цель –

формирование у студентов способностей и навыков к непрерывному самообразованию и профессиональному совершенствованию.

Самостоятельная работа студентов подразумевает проработку лекционного и дополнительного материала, выполнение домашних заданий с последующей проверкой навыков решения задач, а также слушание докладов и сообщений по предлагаемым темам рефератов.

Проработка лекционного материала осуществляется еженедельно после проведения аудиторных занятий в рамках часов, отведенных студентам на самостоятельную работу. Кроме того, работа с лекционным и дополнительным материалом (рекомендованной литературой, приведенной в конце данной программы) проводится в период сессии при подготовке к экзамену по дисциплине.

Выполнение домашних заданий осуществляется раз в две недели в соответствии с графиком изучения соответствующего лекционного материала и проведения практических занятий по соответствующей тематике.

Задачи для выполнения самостоятельных контрольных работ по каждому разделу дисциплины и темы рефератов составляются преподавателем самостоятельно при ежегодном обновлении банка тестовых заданий. Количество вариантов и тем докладов зависит от числа обучающихся.

Примеры предлагаемых тем рефератов:

1. Методы расшифровки атомной структуры кристаллов.
2. Источники рентгеновского излучения для дифракционного анализа.
3. Оптические элементы для управления, коллимации и монохроматизации рентгеновского пучка.

6. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине

6.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточной аттестацией для дисциплины «Введение в структурный анализ твердого тела» является **экзамен**.

По итогам экзамена выставляется оценка по семибалльной шкале: оценки «Плохо» и «Неудовлетворительно» означают отсутствие аттестации, оценки «Удовлетворительно», «Хорошо», «Очень хорошо», «Отлично» и «Превосходно» выставляются при успешном прохождении аттестации.

6.2. Процедуры и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие процедуры и технологии:

- индивидуальное собеседование (промежуточная аттестация).

Контрольные вопросы для индивидуального собеседования представлены в п. 6.3 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Для оценивания результатов обучения в виде умений и навыков используются следующие процедуры и технологии:

- выполнение практических заданий (текущий контроль, промежуточная аттестация).

Примеры практических заданий для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации представлены в п. 6.3 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Критериями оценивания являются полнота знаний, наличие умений и владений (навыков), перечисленных в п. 5 настоящей Рабочей программы дисциплины.

«Плохо» – обучающийся не продемонстрировал никаких знаний об основных теоретических разделах курса, не показал никаких умений и навыков выполнения практических заданий;

«Неудовлетворительно» – обучающийся не продемонстрировал представления об основных теоретических разделах курса, не показал минимально допустимый уровень умений и навыков выполнения практических заданий;

«Удовлетворительно» – обучающийся продемонстрировал изложение формулировок основных теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий базового уровня сложности;

«Хорошо» – обучающийся продемонстрировал связное изложение основных теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий;

«Очень хорошо» – обучающийся продемонстрировал связное изложение практически всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий;

«Отлично» – обучающийся продемонстрировал связное изложение всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий повышенного уровня сложности;

«Превосходно» – обучающийся продемонстрировал уровень знаний в объеме, превышающем стандартную программу подготовки, и продемонстрировал творческий подход к выполнению практических заданий повышенного уровня сложности.

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Теоретические вопросы для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины:

- 1) Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье.
- 2) Прямая и обратная решетка кристалла. 4-х индексные обозначения.
- 3) Одномерный кристалл. Сфера Эвальда. Случаи малых длин волн, больших длин волн и средних длин волн.
- 4) Фурье-образы. Теорема свертки. Принцип взаимности
- 5) Двумерная дифракция. Кристалл конечной толщины и соотношение неопределенностей.

- 6) Одномерная кристаллическая сверхрешетка. Сверхрешетка на вицинальной поверхности. Двумерная модуляция.
- 7) Функция Патерсона. Гомометрические структуры.
- 8) Простейшие структурные типы и две плотнейшие упаковки.
- 9) Точечные группы симметрии кристалла, решетки Браве, пространственные группы симметрии.
- 10) Иерархия кристаллического совершенства вещества (аморфное тело, поликристалл, текстура, мозаичный монокристалл, идеальный монокристалл). Обратное пространство поликристалла. Осевая текстура. Прямая и обратная полюсные фигуры.
- 11) Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры.
- 12) Твердые растворы замещения, коэффициент деформации решетки примесью.
- 13) Начальная, упругая и пластическая деформации в слое; их анализ по сдвигу дифракционных пиков.
- 14) Интенсивность отражения от кристаллической пластинки.
- 15) Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики дю-Монда.
- 16) Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания.

Типовые задачи для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины:

Задача 1

Гетероэпитаксиальная система состоит из подложки Si(001), толстого буферного слоя $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ и тонкого слоя Si на поверхности, причем сопряжение верхнего слоя Si с буфером - бездефектное. Экспериментально измерены: деформация решетки буфера относительно подложки в плоскости слоя $\varepsilon_x=0.01$ и по нормали к поверхности $\varepsilon_z=0.046$.

Определить: концентрацию x_{Ge} в буфере; упругие напряжения в буфере и слое Si; плотность дислокаций несоответствия в гетеропереходе между подложкой и буфером.

Использовать численные константы:

$$(a_{\text{Ge}}-a_{\text{Si}})/a_{\text{Si}}=0.04; \quad \varepsilon_z^{\text{elast}} / \varepsilon_x^{\text{elast}} = -0.8; \quad \sigma_x = \varepsilon_x^{\text{elast}} \times 150 \text{ [ГПа]};$$

вектор Бюргерса в проекции на плоскость слоя $b_x=0.5\text{нм}$.

Задача 2

Определить, являются ли две структуры А и Б гомометрическими, т.е. неразличимыми по интенсивности дифракционной картины. Структуры одномерные, содержат по 5 одинаковых атомов, период $a=10$. Координаты атомов: А- $x_i = 0, 3, 4, 5, 6$; Б- $x_i = 0, 1, 3, 4, 5$.

Задача 3

Рассмотреть, чем должны различаться схемы сканирования обратного пространства при измерении на рентгеновском дифрактометре интегральной интенсивности брегговского отражения в случаях: 1- тонкая эпитаксиальная пленка совершенного кристалла; 2 - толстый эпитаксиальный слой мозаичного кристалла.

7. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Положение «О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в ННГУ», утвержденное приказом ректора ННГУ от 13.02.2014 г. №55-ОД,

Положение о фонде оценочных средств, утвержденное приказом ректора ННГУ от 10.06.2015 №247-ОД.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Основы дифракционного структурного анализа»

а) основная литература:

1. Е.В.Чупрунов, А.Ф.Хохлов, М.А.Фаддеев. Основы кристаллографии. М. 2006 г.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59410&DB=1>
2. П.В. Андреев, В.Н. Трушин, М.А. Фаддеев. Рентгеновский фазовый анализ поликристаллических материалов. Нижний Новгород. ННГУ. 2013.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=454818&DB=1>
3. Г.С.Жданов, А.С.Илюшин, С.В.Никитина. Дифракционный и резонансный структурный анализ. М. Наука. 1980. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=81138&DB=1>
4. М.П.Шаскольская. Кристаллография. М. 1984 г.-
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=99250&DB=1>
5. Ю.Н.Сироткин, М.П.Шаскольская. Основы кристаллофизики. М. Наука, 1979 г.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=99234&DB=1>
6. Берклеевский курс физики, том III. Ф. Крауфорд. Волны. М. Наука. 1984.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=67879&DB=1>

б) дополнительная литература:

1. Най Дж. Физические свойства кристаллов/Дж. Най. - М.: Мир, 1967. - 385 с.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=97358&DB=1>
2. Каули Дж. Физика дифракции. М. Мир, 1979.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=73902&DB=1>
3. Е.В. Зайцева, М.А. Фаддеев, Е.В. Чупрунов. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в кристаллах. ННГУ. 1999. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=43509&DB=1>
4. З.Г. Пинскер. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М. Наука. 1974. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=99593&DB=1>

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

- 1) <http://pubs.acs.org/>
- 2) <http://ru.wikipedia.org/wiki/>
- 3) <http://www.elementy.ru>
- 4) <http://eqworld.ipmnet.ru/>
- 5) <http://ibooks.ru/>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения лекций и практических занятий требуется типовое оборудование лекционной аудитории.

Для подготовки самостоятельных контрольных работ и для их графического представления (если это необходимо), а также для расширения коммуникационных

возможностей студенты имеют возможность работать в компьютерных классах с соответствующим лицензионным программным обеспечением и выходом в Интернет.

Программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 03.04.02 Физика.

Автор(ы) _____ П.А. Юнин

Рецензент(ы) _____

Заведующий кафедрой _____ З.Ф. Красильник

Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии физического факультета ННГУ от «____» _____ 202_ года, протокол № б/н.

Председатель
Учебно-методической комиссии
физического факультета ННГУ _____ / Перов А.А. /