

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

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

Радиофизический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Основы дифракционного структурного анализа

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

03.04.03 - Радиофизика

Направленность образовательной программы

Физическая электроника

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.ДВ.01.02 Основы дифракционного структурного анализа 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-1: Способен анализировать и обрабатывать научную информацию и результаты исследований в области радиофизики, микро- и наноэлектроники, мощной электроники при решении задач своей профессиональной деятельности	ПК-1.1: Применяет принципы сбора и анализа информации, рассматривает и оценивает современные научные достижения, а также генерирует новые идеи при решении исследовательских и практических задач ПК-1.2: Работает с большим объемом данных, систематизирует и анализирует информацию, полученную из различных источников, в том числе с использованием современных информационных и коммуникационных технологий	ПК-1.1: Знать основные понятия дифракционного структурного анализа. ПК-1.2: Знать принципы получения, методы обработки и интерпретации результатов экспериментов по дифракционному анализу твердых тел. Владеть навыками поиска (в том числе, с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике дифракционного структурного анализа.	Реферат	Зачёт: Контрольные вопросы
ПК-2: Способен выполнять теоретические и экспериментальные исследования и разработки по отдельным разделам тем научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области радиофизики, микро- и наноэлектроники, мощной электроники и	ПК-2.1: Анализирует современное состояние исследований в области микро- и наноэлектроники, мощной электроники, современные подходы к описанию и моделированию различных физических явлений и оценке полученных результатов ПК-2.2: Выбирает и применяет аналитические, аналитико-численные, экспериментальные методы исследования в соответствии с типом	ПК-2.1: Знать современное состояние исследований в области структурного анализа. ПК-2.2: Уметь выбирать подход к решению поставленной задачи и применять полученные в ходе освоения дисциплины знания для решения практических задач. Владеть приемами построения обратного	Задания	Зачёт: Задачи

оформлять их результаты	<p>поставленной задачи</p> <p>ПК-2.3: Участвует в планировании, подготовке и проведении НИР</p> <p>ПК-2.4: Анализирует полученные данные, формулирует выводы и рекомендации по отдельным разделам тем в области микро- и нанoeлектроники, мощной электроники</p>	<p>пространства для кристаллических объектов различного типа;</p> <p>-способами перехода от картины в обратном пространстве к дифракционной картине, регистрируемой прибором;</p> <p>-способами анализа основных параметров кристаллической структуры и микроструктуры по дифракционной картине;</p> <p>ПК-2.3: Знать основные принципы организации научного исследования.</p> <p>ПК-2.4: Уметь применять полученные в ходе освоения дисциплины знания для описания физических эффектов в области, соответствующей тематике курса.</p>		
<p>ПК-3: Способен разрабатывать и подготавливать составные части документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок</p>	<p>ПК-3.1: Использует знание нормативных документов для составления заявок, грантов, проектов НИР, применяет заданные требования и правила при оформлении рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях</p> <p>ПК-3.2: Представляет результаты НИР академическому и бизнес-сообществу</p> <p>ПК-3.3: Участвует в составлении и подаче конкурсных заявок на выполнение научно-исследовательских и проектных работ по направленности Радиофизика</p>	<p>ПК-3.1: Знать основные методы написания протоколов и отчетов по измерениям</p> <p>Уметь оформлять рукописи, протоколы, отчеты</p> <p>ПК-3.2: Знать правила создания и нормы представления научных презентаций.</p> <p>Владеть навыками создания и публичного представления презентаций в соответствии с нормами, принятыми в академическом сообществе.</p> <p>ПК-3.3: Владеть навыками оформления научных обзоров, протоколов и отчетов.</p>	Реферат	Зачёт: Доклад

--	--	--	--	--

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	
	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0
Тема 1. Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье	6		3	3	3
Тема 2. Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов	4		2	2	2
Тема 3. Периодически модулированные структуры	6		3	3	3
Тема 4. Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов	4		2	2	2
Тема 5. Влияние симметрии кристалла на картину дифракции	6		3	3	3
Тема 6. Кристалл с дефектами	4		2	2	2
Тема 7. Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра	7		3	3	4
Тема 8. Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры	7		3	3	4
Тема 9. Измерение упругих деформаций и концентрации твердого	11		5	5	6

раствора					
Тема 10. Интенсивность отражения от кристаллической пластинки	10		4	4	6
Тема 11. Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда	3		1	1	2
Тема 12. Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания	3		1	1	2
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	72	0	32	33	39

Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1. Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье

Тема 2. Определение геометрии дифракционной картины с помощью Фурье-образов рассеивающих объектов

Тема 3. Периодически модулированные структуры

Тема 4. Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов

Тема 5. Влияние симметрии кристалла на картину дифракции

Тема 6. Кристалл с дефектами

Тема 7. Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра

Тема 8. Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры

Тема 9. Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора

Тема 10. Интенсивность отражения от кристаллической пластинки

Тема 11. Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда

Тема 12. Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания

Практические занятия /лабораторные работы организуются, в том числе, в форме практической подготовки, которая предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

На проведение практических занятий / лабораторных работ в форме практической подготовки отводится: очная форма обучения - 4 ч.

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.

-

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 - Реферат) для оценки сформированности компетенции ПК-1:

Подготовить реферат на выбранную тему. Типовые варианты тем:

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

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Реферат) для оценки сформированности компетенции ПК-3:

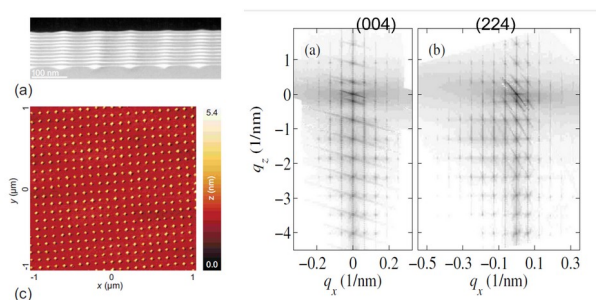
Подготовить и оформить реферат в соответствии с требованиями.

Критерии оценивания (оценочное средство - Реферат)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Компетенция сформированы на уровне, не ниже "удовлетворительно".
не зачтено	Компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно» или «плохо»

5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ПК-2:

Пример 3-х мерной модуляции взят из статьи PHYSICAL REVIEW B 79, 035324 (2009).
На поверхность Si(001) многократно высаживались поочередно островки GeSi и слои Si.



Приведены: изображение поперечного сечения, полученное с помощью просвечивающего электронного микроскопа (ТЕМ),

профиль поверхности, полученный с помощью атомно-силового сканирующего микроскопа (AFM),

двумерные карты обратного пространства вблизи двух узлов решетки Si, полученные методом рентгеновской дифракции (XRD).

1) Оценить по картинкам ТЕМ, АФМ и XRD, согласуются ли определенные разными методами периоды модуляции (по вертикали и горизонтали).

2) Можно ли объяснить расхождение тем, что координаты обратного пространства домножены в данной статье на 2π ?

Критерии оценивания (оценочное средство - Задания)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Компетенция сформирована на уровне, не ниже "удовлетворительно".
не зачтено	Компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно» или «плохо»

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

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора 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 отдельными 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	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

	отказа обучающегося от ответа	ошибки	х задач с некоторым и недочетами	некоторым и недочетами	ошибок и недочетов	без ошибок и 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-1

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.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Компетенция сформирована на уровне, не ниже "удовлетворительно".
не зачтено	Компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно» или «плохо»

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

Задача 1.

С помощью свертки двух одномерных рядов точечных рассеивающих центров $p(x)$ и $g(y)$ получить Фурье-образ двумерной решетки с элементарной ячейкой $a \perp b$, $g \perp 90^\circ$. (Графически или аналитически.) Показать, чему равен угол g^* в обратной решетке.

Задача 2.

Найти индексы (hkl) плоскости, перпендикулярной к оси x в решетке гексагонального кристалла [вариант: плоскости, перпендикулярной оси y]. Записать компоненты вектора, идущего вдоль этой оси.

Задача 3.

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

Задача 4.

Определить вид диффузного фона одномерной структуры с дивакансиями, если расстояние между вакансиями одной пары $a' = 2a$, т.е. они разделены одним атомом. Пары между собой расположены неупорядоченно.

Задача 5.

Определить индексы первых трех линий на дебаеграмме поликристалла NaCl с учетом интегральных погасаний, (пространственная группа Fm3m).

Задача 6.

Какие отражения погаснут для кристалла с винтовой осью 6_1 вдоль оси z (поворот и сдвиг на $c/6$) ?

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Компетенция сформирована на уровне, не ниже "удовлетворительно".
не зачтено	Компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно» или «плохо»

5.3.3 Типовые задания (оценочное средство - Доклад) для оценки сформированности компетенции ПК-3

Сделать доклад по теме реферата.

Критерии оценивания (оценочное средство - Доклад)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Компетенция сформирована на уровне, не ниже "удовлетворительно".
не зачтено	Компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно» или «плохо»

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

Основная литература:

1. Зайцева Е. В. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в кристаллах : учеб. пособие. Ч. 1 / Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского. - Н. Новгород : Изд-во Нижегород. гос. ун-та, 1999. - 131 с. - ISBN 5-85746-446-3 : 28.00., 4 экз.
2. Жданов Герман Степанович. Дифракционный и резонансный структурный анализ : Рентгено-, электроно-, нейтроно-, мессбауэрография и мессбауэровская спектроскопия : [учеб. пособие для вузов] / под общ. ред. Г. С. Жданова. - М. : Наука, 1980. - 254 с. : ил. - 0.80., 5 экз.
3. Каули Джон М. Физика дифракции / пер. с англ. А. С. Авилова, Л. И. Ман ; под ред. [и с предисл.] З. Г. Пинскера. - М. : Мир, 1979. - 431 с. : ил. - 2.90., 4 экз.
4. Чупрунов Евгений Владимирович. Основы кристаллографии : учеб. для студентов вузов, обучающихся по физ. и хим. специальностям. - М. : Физматлит, 2006. - 500 с. - ISBN 5-94052-060-1

: 160.00., 1 экз.

Дополнительная литература:

1. Сиротин Юрий Исакович. Основы кристаллофизики : [учеб. пособие для физ. специальностей вузов]. - 2-е изд., перераб. - М. : Наука, 1979. - 639 с. : ил. - 1.80., 7 экз.

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

<http://eqworld.ipmnet.ru/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

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 03.04.03 - Радиофизика.

Автор(ы): Юнин Павел Андреевич, кандидат физико-математических наук
Дроздов Юрий Николаевич, доктор физико-математических наук.

Заведующий кафедрой: Красильник Захарий Фишелевич, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 18.12.2023, протокол № 09/23.