

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 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

11.04.04 - Электроника и нанoeлектроника

Направленность образовательной программы

Твердотельная электроника и нанoeлектроника

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.ДВ.04.02 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-4: Готовность формулировать цели и задачи научных исследований в соответствии с тенденциями и перспективами развития электроники и нанoeлектроники, а также смежных областей науки и техники, и способность обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач	<p>ПК-4.1: Знает тенденции и перспективы развития электроники и нанoeлектроники, а также смежных областей науки и техники</p> <p>ПК-4.2: Способен рассчитывать предельно допустимые и предельные режимы работы изделий микро- и нанoeлектроники</p> <p>ПК-4.3: Имеет навыки обоснованного выбора теоретических и экспериментальных методов исследования изделий микро- и нанoeлектроники</p>	<p>ПК-4.1:</p> <p>Знать основные дифракционные методы исследования твердых тел. Знать современные 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.</p> <p>ПК-4.2:</p> <p>Уметь пользоваться основными подходами для анализа структуры твердых тел; на полученных в ходе освоения дисциплины знаниях. Уметь применять полученные знания для решения практических задач, исследования физических эффектов в области, соответствующей тематике курса, ориентироваться в современной научной</p>	Задачи	Экзамен: Контрольные вопросы

		<p>литературе по вопросам дифракционного структурного анализа твердых тел</p> <p>ПК-4.3: Владеть навыками решения задач, основанными на полученных в ходе освоения дисциплины знаниях. Владеть навыками анализа и постановки задач в области дифракционных методов исследования твердых тел, навыками организации и проведения самостоятельной исследовательской работы.</p>		
--	--	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	4
Часов по учебному плану	144
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	58
Промежуточная аттестация	36 Экзамен

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

Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье	6	2		2	4
Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов	14	2	4	6	8
Периодически модулированные структуры. Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов	18	2	6	8	10
Влияние симметрии кристалла на картину дифракции. Кристалл с дефектами. Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра	20	4	6	10	10
Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры. Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора	20	2	8	10	10
Интенсивность отражения от кристаллической пластинки	14	2	4	6	8
Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда	14	2	4	6	8
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	144	16	32	50	58

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье.
2. Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов
3. Периодически модулированные структуры. Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов
4. Влияние симметрии кристалла на картину дифракции. Кристалл с дефектами. Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра
5. Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры. Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора
6. Интенсивность отражения от кристаллической пластинки.
7. Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда. Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания

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.

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 (в соответствии с содержанием дисциплины)

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/>

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-4:

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 $\epsilon_x=0.01$ и по нормали к поверхности $\epsilon_z=0.046$.

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:

$$(a_{\text{Ge}}-a_{\text{Si}})/a_{\text{Si}}=0.04; \quad \epsilon_z^{\text{elast}} / \epsilon_x^{\text{elast}} = -0.8; \quad s_x = \epsilon_x^{\text{elast}} \cdot 150 [\text{ГПа}];$$

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- $x_j = 0, 3, 4, 5, 6$; Б- $x_j = 0, 1, 3, 4, 5$.

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.

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Справедливо одно из следующих утверждений: (1). Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач. (2). Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов. (3). Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. (4). Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами. (5). Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок. Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме. Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами.
не зачтено	Справедливо одно из следующих утверждений: (1). Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки. (2). Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа. Отсутствие минимальных умений.

Оценка	Критерии оценивания
	Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа. Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа

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 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-4

- 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
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»
неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно»
плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

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

Основная 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. Андреев Павел Валерьевич. Рентгеновский фазовый анализ поликристаллических материалов : учеб. пособие для студентов ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 011200 "Физика", 210100 "Электроника и нанoeлектроника", 210600 "Нанотехнология", 230400 "Информационные системы и технологии" и специальностям 210601 "Нанотехнология в электронике", 010701 "Физика" и 230201 "Информационные системы и технологии" / под ред. Е. Д. Чупрунова ; ННГУ. - Н. Новгород : Изд-во ННГУ, 2013. - 123 с. - ISBN 978-5-91326-3/2-4 : 70.00., 15 экз.
3. 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.
4. Шаскольская Марианна Петровна. Кристаллография : [учеб. пособие для втузов]. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1984. - 375 с., 4 л. ил. : ил. - 1.40., 96 экз.
5. 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.

Дополнительная 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. Пинскер Зиновий Григорьевич. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах / АН СССР, Ин-т кристаллографии им. А. В. Шубникова. - М. : Наука, 1974. - 368 с. : ил. - 1.67., 2 экз.

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

- 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/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами, специализированным оборудованием: Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами, специализированным оборудованием: 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. Помещения для самостоятельной работы

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

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 ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 11.04.04 - Электроника и наноэлектроника.

Автор(ы): Юнин Павел Андреевич, кандидат физико-математических наук.

Заведующий кафедрой: Павлов Дмитрий Алексеевич, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 09.01.2024, протокол № б/н.