

Институт физики микроструктур РАН —
филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной физики Российской академии наук»

УТВЕРЖДАЮ

Врио директора ИФМ РАН

_____ З.Ф.Красильник

"11" апреля 2016 г.

Рабочая программа дисциплины
Структурный анализ твердого тела

Направление подготовки

03.06.01 «Физика и астрономия»

Направленность (профиль) программы

01.04.01 «Приборы и методы экспериментальной физики»

Квалификация (степень) выпускника

исследователь - преподаватель, исследователь

Форма обучения

очная

Нижний Новгород

2016

1. Место и цели дисциплины в структуре ООП аспирантуры

Дисциплина «Структурный анализ твердого тела» является дисциплиной по выбору вариативной части программы 01.04.01 «Приборы и методы экспериментальной физики».

Для успешного усвоения курса аспиранту необходимо знание общих курсов физики и математики, электродинамики, теории колебаний и волн, физики твердого тела. Данный курс является базой для выполнения аспирантами исследований в области использования явления дифракции для получения информации об атомной структуре твердых тел.

Дисциплина изучается на 1 курсе (1 семестр).

Целями освоения дисциплины являются:

- формирование у аспирантов представления о современной методологии дифракционных методов исследования твердых тел;
- формирование у аспирантов компетенций программы 01.04.01 «Приборы и методы экспериментальной физики», в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия».

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия»

В результате освоения дисциплины обучающийся должен овладеть следующими компетенциями результатами обучения по дисциплине:

Код компетенции	Результаты освоения ООП Содержание компетенций	Перечень результатов планируемых обучения по дисциплине
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	ЗНАТЬ: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных областях. УМЕТЬ: проводить анализ литературных данных в рамках поставленной исследовательской (практической, образовательной) задачи, выявлять основные вопросы и проблемы, существующие в современной науке; при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений. ВЛАДЕТЬ: навыками критического анализа и

		оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области разработки приборов и методов экспериментальной физики с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<p>ЗНАТЬ: теоретические основы организации научно-исследовательской деятельности; методы сбора информации для решения поставленных исследовательских задач; методы анализа данных, необходимых для проведения конкретного исследования.</p> <p>УМЕТЬ: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования планировать, организовывать и проводить научно-исследовательские и производственно-технические исследования с применением современной аппаратуры, оборудования и компьютерных технологий; самостоятельно выполнять теоретические, экспериментальные и вычислительные физические исследования при решении научно-исследовательских и производственных задач с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств.</p> <p>ВЛАДЕТЬ: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками работы на современной</p>

		<p>аппаратуре и оборудовании для выполнения физических исследований;</p> <p>способностью самостоятельно с применением современных компьютерных технологий;</p> <p>анализировать, обобщать и систематизировать результаты физических работ.</p>
ПК-1	<p>способность самостоятельно проводить научные исследования в области профессиональной деятельности и применять полученные результаты для решения практических задач</p>	<p>ЗНАТЬ:</p> <p>основные законы, теоретические модели и современные методы исследований и математического моделирования в области профессиональной деятельности.</p> <p>УМЕТЬ:</p> <p>использовать полученные знания для анализа результатов научных исследований и решения практических задач в области профессиональной деятельности.</p> <p>ВЛАДЕТЬ:</p> <p>разработкой методов научного исследования для получения новых фундаментальных знаний в области профессиональной деятельности и способами применения этих знаний для создания прикладных технологий и решения практических задач.</p>
ПК-2	<p>способность к системному анализу современных проблем физики и комплекса новейших знаний и достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности</p>	<p>ЗНАТЬ:</p> <p>Базовые законы современной физики и их взаимосвязь, тенденции развития физики в обозримой перспективе, основные проблемы, стоящие перед современной физикой, а также предлагаемые средства их решения.</p> <p>УМЕТЬ:</p> <p>понимать суть явлений и процессов, изучаемых физикой.</p> <p>ВЛАДЕТЬ:</p> <p>основами методологии и практическими навыками научного познания при изучении различных уровней организации материи, пространства и времени.</p>
ПК-3	<p>способность использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или</p>	<p>ЗНАТЬ:</p> <p>основные методы обработки данных, полученных</p>

	методы численного моделирования сложных физических процессов в области профессиональной деятельности.	экспериментально или методами численного моделирования. УМЕТЬ: выделять и систематизировать необходимые научные данные; критически оценивать их достоверность. ВЛАДЕТЬ: навыками сбора, обработки, анализа и систематизации научных данных; навыками статистического анализа экспериментальных данных; навыками аналитических и численных аппроксимаций функций.
--	---	--

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 3 зачетных единиц (ЗЕ), 108 часов.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	36
Аудиторная работа (всего):	36
в том числе:	
Лекции	18
Практические занятия	18
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	72
Вид итогового контроля	Зачет

3.2. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№	Раздел дисциплины	Всего	Контактная работа		Самостоятельная работа
			Лекционные занятия	Практические занятия	
1	Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье.	6	1	1	4
2	Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов.	12	2	2	8

3	Периодически модулированные структуры.	6	1	1	4
4	Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов.	6	1	1	4
5	Влияние симметрии кристалла на картину дифракции.	12	2	2	8
6	Кристалл с дефектами.	6	1	1	4
7	Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра.	12	2	2	8
8	Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры.	12	2	2	8
9	Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора.	12	2	2	8
10	Интенсивность отражения от кристаллической пластинки.	6	1	1	4
11	Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда.	6	1	1	4
12	Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания.	12	2	2	8
Дисциплина в целом		108	18	18	72

3.3 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1	Предмет дифракционного структурного анализа. Структурный анализ как преобразование Фурье.	Общая постановка задачи. Ограниченность волновых и корпускулярных интерпретаций. Описание однократного рассеяния как преобразования Фурье. Решение обратной задачи в схемах оптического микроскопа, рентгеновского дифрактометра и электронного микроскопа. Прямая

		и обратная решетка кристалла. 4-х индексные обозначения.
2	Определение геометрии дифракционной картины с помощью фурье-образов рассеивающих объектов.	Одномерный кристалл. Сфера Эвальда. Случай малых длин волн, больших длин волн и средних длин волн. Фурье-образы некоторых функций. Теорема свертки. Принцип взаимности (задача о радиотелескопе). Двумерная дифракция. Кристалл конечной толщины и соотношение неопределенностей. Щель с размытыми краями. Набор щелей конечной ширины. Продольная и поперечная длина когерентности.
3	Периодически модулированные структуры.	Одномерная кристаллическая сверхрешетка. Сверхрешетка на вицинальной поверхности. Двумерная модуляция.
4	Фазовая проблема и ее решение патерсоновскими и прямыми методами. Атомное строение некоторых кристаллов.	Функция Патерсона. Гомометрические структуры. Простейшие структурные типы и две плотнейшие упаковки.
5	Влияние симметрии кристалла на картину дифракции.	Точечные группы симметрии кристалла, решетки Браве, пространственные группы симметрии. Графики простейших групп. Интегральные, зональные и сериальные погасания.
6	Кристалл с дефектами.	Усреднение в пространстве и во времени. Упругое и неупругое рассеяние. Брегговские максимумы и диффузный фон. Когерентность при рассеянии бозонов и фермионов. Дефекты с сохранением усредненной решетки. Вакансия и дивакансия. Тепловые колебания атомов. 4-х мерная функция Паттерсона. Фактор Дебая-Валера. Шероховатая поверхность. Фрактальная шероховатость.
7	Особенности анализа поликристалла и осевой текстуры. Основные типы рентгеновской дифракционной аппаратуры. Особенности рентгеновского дифрактометра.	Иерархия кристаллического совершенства вещества (аморфное тело, поликристалл, текстура, мозаичный монокристалл, идеальный монокристалл). Обратное пространство поликристалла и современные базы дифракционных данных. Осевая текстура. Прямая и обратная полюсные фигуры.
8	Дифракционное исследование эпитаксиальных гетероструктур. Анализ мозаичной структуры.	Эпитаксиальные соотношения. 4-х доменное микродвойникование в слоях YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x} . Вклад в ширину пика от микродеформаций, размера области когерентного рассеяния, разориентации блоков и изгиба. Разделение вкладов. Твердые растворы замещения, коэффициент деформации решетки примесью.
9	Измерение упругих деформаций и концентрации твердого раствора.	Начальная, упругая и пластическая деформации в слое; их анализ по сдвигу дифракционных пиков. Эпюра упругих напряжений. Формула Стоуни.
10	Интенсивность отражения от кристаллической пластинки.	Вывод коэффициента отражения в геометрии Френеля.
11	Кинематическое и динамическое рассеяние. Графики Дю-Монда.	Ряд Борна, кинематическое, динамическое и полукинематическое приближения. Метод дарвиновского суммирования. Столик Дарвина.

		Анализ схем двухкристального и трехкристального спектрометра с помощью графиков дю-Монда. Схема вывода уравнений по Эвальду-Лауэ, дисперсионные поверхности в случае Брегга и Лауэ. Пример использования стоячих волн.
12	Рекуррентная формула для многослойной структуры. Диагностика дефектов эпитаксиальных гетероструктур по кривым качания.	Схема вывода рабочих формул для анализа многослойных структур по динамической теории рассеяния. Кривые дифракционного отражения идеального слоя и периодической многослойной структуры. Влияние некоторых типов несовершенств на вид кривых качания.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в рамках занятий практического и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций. Итоговый контроль осуществляется на зачете, в ходе которого оцениваются уровень теоретических знаний и навыки решения практических задач.

4. Образовательные технологии

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

Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) по дисциплине проходит в форме лекций и практических занятий, а также в виде коллективных и индивидуальных консультаций. На занятиях лекционного типа используются мультимедийные средства поддержки образовательного процесса, часть занятий проводятся в виде лекций с проблемным изложением материала. На занятиях практического типа разбираются решения задач различной степени сложности, проводятся обсуждения рассматриваемых проблем в свете последних научных достижений в данной области. Аспиранты работают как индивидуально, так и коллективно.

Самостоятельная работа включает в себя выполнение домашних заданий, подготовку семинаров, а также теоретическую подготовку к занятиям по материалам лекций и рекомендованной литературе, приведенной в конце данной программы. Кроме того, аспиранты имеют возможность принимать участие в семинарах с представителями российских и зарубежных научных организаций, мастер-классах экспертов и специалистов в области современных задач структурного анализа твердых тел.

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

В курсе запланировано на самостоятельную работу аспирантов 72 часа (67 % общего объема). Самостоятельная работа аспирантов является одним из видов учебных занятий, выполняется по заданию преподавателя индивидуально и без его непосредственного участия. Самостоятельная работа аспиранта – неотъемлемая часть подготовки высококвалифицированного специалиста в соответствующей области. Ее цель – систематизация и закрепление полученных знаний и умений, углубление и расширение знаний, приобретение навыков самостоятельной работы с литературой, формирование

способностей и навыков к непрерывному самообразованию и профессиональному совершенствованию.

Самостоятельная работа аспиранта подразумевает проработку лекционного и дополнительного материала, решение домашних задач с последующей проверкой навыков решения задач. Проработка лекционного материала осуществляется еженедельно после проведения аудиторных занятий в рамках часов, отведенных аспирантам на самостоятельную работу. Кроме того, работа с лекционным и дополнительным материалом (рекомендованной литературой, приведенной в конце данной программы) проводится при подготовке к зачету по дисциплине. Выполнение домашних работ осуществляется еженедельно или раз в две недели в соответствии с графиком изучения соответствующего лекционного материала и проведения практических занятий по соответствующей тематике.

6. Фонд оценочных средств по дисциплине

6.1 Типовые контрольные задания или иные материалы

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.

6.2. Описание шкал оценивания

Итоговый контроль качества усвоения аспирантами содержания дисциплины проводится в виде зачета, на котором определяется:

- уровень усвоения основного учебного материала по дисциплине;
- уровень понимания изученного материала;
- способности использовать полученные знания для решения конкретных задач.

Зачет проводится в устной форме. Устная часть заключается в ответе аспирантом на теоретические вопросы курса (с предварительной подготовкой) и последующем собеседовании в рамках тематики курса. Собеседование проводится в форме вопросов, на которые аспирант должен дать краткий ответ. Практическая часть предусматривает решение двух задач по различным разделам курса.

Зачет ставится при уровне знаний на оценку «удовлетворительно» и выше.

Оценка	Уровень подготовки
Отлично	<p>Высокий уровень подготовки с незначительными ошибками. Аспирант дает полный и развернутый ответ на все теоретические вопросы билета; точно отвечает на дополнительные вопросы; приводит почти полные, аргументированные решения всех сформулированных в билете задач с незначительными недочетами. Изложение решений и полученные ответы отличаются логической последовательностью, четкостью в выражении мыслей и обоснованностью выводов, демонстрирующих знание общефизических и профессиональных дисциплин, умение применять на практике приобретенные навыки, владение методиками решения задач.</p> <p>Выполнение контрольных экзаменационных заданий на 90% и выше</p>
Хорошо	<p>В целом хорошая подготовка с заметными ошибками или недочетами. Аспирант дает полный ответ на все теоретические вопросы билета с небольшими неточностями, допускает ошибки при ответах на дополнительные вопросы; приводит почти полные решения всех сформулированных в билете задач с некоторыми недочетами; или исчерпывающее решение приведено только для одной из двух задач билета, а вторая задача решена со значительными погрешностями. Изложение решений и полученные ответы отличаются логической последовательностью, достаточной четкостью в выражении мыслей и не всегда полной обоснованностью выводов, демонстрирующих, в целом, знание общефизических и профессиональных дисциплин, умение применять на практике приобретенные навыки, владение основными методиками решения задач.</p> <p>Выполнение контрольных экзаменационных заданий от 70 до 90%.</p>
Удовлетворительно	<p>Минимально достаточный уровень подготовки. Аспирант показывает минимальный уровень теоретических знаний, допускает ошибки при ответах на дополнительные вопросы; приводит неполные, слабо аргументированные решения всех сформулированных в билете задач. Изложение решений и полученные ответы не отличаются стройной логической последовательностью, четкостью в выражении мыслей и обоснованностью выводов, что говорит о не достаточно полном понимании общефизических и профессиональных дисциплин, умении применять на практике лишь некоторые приобретенные навыки, владении не всеми изученными методиками решения задач.</p> <p>Выполнение контрольных экзаменационных заданий от 50 до</p>

	70%.
Неудовлетворительно	Подготовка недостаточная и требует дополнительного изучения материала. Аспирант дает ошибочные ответы, как на теоретические вопросы билета, так и на наводящие и дополнительные вопросы экзаменатора; приводит решения сформулированных в билете задач с грубыми недочетами, что говорит о недостатке знаний по общефизическим и профессиональным дисциплинам, отсутствии умения применять на практике приобретенные навыки, не владение методиками решения задач. Выполнение контрольных экзаменационных заданий до 50%.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., курс "Теоретическая физика", Том II. «Теория поля». М.: Физматлит, 2006.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., курс "Теоретическая физика", Том III. «Квантовая механика». М.: Наука. 2002.

б) дополнительная литература:

1. Боуэн Д.К., Таннер Б.К., «Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография». СПб.: Наука, 2002.
2. Успехи физических наук (<https://ufn.ru/ru/>).
3. Reviews of Modern Physics (RMP) (<https://journals.aps.org/rmp/>).
4. Surface Science (<https://www.journals.elsevier.com/surface-science>).
5. Physical Review B (PRB) (<https://journals.aps.org/prb/>)

в) факультативная литература

1. Е.В.Чупрунов, А.Ф.Хохлов, М.А.Фаддеев. Основы кристаллографии. М. 2006 г.
2. П.В. Андреев, В.Н. Трушин, М.А. Фаддеев. Рентгеновский фазовый анализ поликристаллических материалов. Нижний Новгород. ННГУ. 2013.
3. Г.С.Жданов, А.С.Илюшин, С.В.Никитина. Дифракционный и резонансный структурный анализ. М. Наука. 1980.
4. М.П.Шаскольская. Кристаллография. М. 1984 г.
5. Ю.Н.Сироткин, М.П.Шаскольская. Основы кристаллофизики. М. Наука, 1979 г.
6. Берклеевский курс физики, том III. Ф. Крауфорд. Волны. М. Наука. 1984.
7. Най Дж. Физические свойства кристаллов/Дж. Най. - М.: Мир, 1967. - 385 с.
8. Каули Дж. Физика дифракции. М. Мир, 1979.
9. Е.В. Зайцева, М.А. Фаддеев, Е.В. Чупрунов. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в кристаллах. ННГУ. 1999.
10. З.Г. Пинскер. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М. Наука. 1974.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Использование программного обеспечения:

1. Microsoft Office Word.
2. Microsoft Office Excel.
3. Microsoft Office Power Point.
4. Free Origin Viewer.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

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 аспиранты имеют возможность работать за компьютером с соответствующим лицензионным программным обеспечением и выходом в Интернет.

Составитель:

Юнин П.А., к.ф.-м.н., н.с. отдела технологии наноструктур и приборов ИФМ РАН

Рецензент:

Аладышкин А.Ю., к.ф.-м.н., с.н.с. отдела физики сверхпроводников ИФМ РАН