

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 4 от 27 мая 2016 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Дифракционные и спектральные методы исследования тонкопленочных материалов и гетероструктур.**

Краткая аннотация: Программа курса «Дифракционные и спектральные методы исследования тонкопленочных материалов и гетероструктур» предназначена для аспирантов, специализирующихся в области химии неорганических веществ и материалов, научная работа которых связана с тонкопленочными материалами. В курсе рассматриваются понятия одно- и двухосной текстуры и способы ее представления; способы представления обратного пространства; методы исследования обратного пространства с помощью рентгеновской, нейтронной и электронной дифракции; особенности различных геометрий дифракционных экспериментов применительно к ориентированным тонким пленкам и гетероструктурам; особенности применения спектроскопических методов (EDX, RBS, XPS, SIMS, EELS) для изучения состава тонких пленок и гетероструктур.

2. Уровень высшего образования– подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленность (профиль) Неорганическая химия, Химия твердого тела

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)», которую учащийся может освоить на выбор из списка предложенных в период обучения, отмеченный в базовом учебном плане

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

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
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	В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-1 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.01 Неорганическая химия	З8 (ПК-1) Знать современные методы исследования тонких пленок неорганических материалов и гетероструктур У6 (ПК-1) Уметь использовать современные методы исследования тонких пленок при решении практических задач неорганической химии
ПК-16	З8 (ПК-16) Знать методы исследования эпитаксиальных

способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела

отношений на интерфейсах пленка-подложка и пленка-пленка в гетероструктурах
У5 (ПК-16) **Уметь** использовать методы рентгеновской дифракции для определения эпитаксиальных напряжений в тонких пленках.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 54 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (26 часов занятия лекционного типа, 18 часов занятий семинарского типа, 4 часа групповых консультаций, 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 54 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

ЗНАТЬ: фундаментальные основы неорганической химии, химии твердого тела и кристаллохимии

УМЕТЬ: анализировать данные экспериментальных исследований и обобщать полученные результаты

ВЛАДЕТЬ: базовыми представлениями о дифракционных и спектроскопических методах исследования неорганических веществ

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Работа с литературой	Всего
Тема 1. Текстура и обратное пространство.	23	6	4			1	11	6	6	12
Тема 2. Дифракционные методы исследования тонких пленок и гетероструктур	61	14	10	4		1	29	24	8	32
Тема 3. Применение спектроскопических методов для анализа тонких пленок	21	6	4			1	11	4	6	10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	3					3	3			
Итого	108	26	18	4		6	54	34	20	54

8. Образовательные технологии

Преподавание дисциплин в форме авторского курса с использованием мультимедийных презентаций в формате традиционных лекций и лекций-демонстраций посвященных проблемам комплексного анализа тонкопленочных материалов. Демонстрации составлены на основе результатов исследований научных школ МГУ и современных актуальных публикаций в ведущих научных журналах.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень домашних заданий. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Т.Л. Алфорд, Л.К. Фельдман, Д.В. Майер, Фундаментальные основы анализа нанопленок. / Пер. с англ. Образцов А.Н., Долганов М.А. - М.: Научный мир, 2012. - 392 с.
2. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А., "Рентгенографический и электронно-оптический анализ металлов", 1996 (или 2001).
3. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. "Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия" 1982.
4. Уманский Я.С. "Рентгенография металлов и полупроводников", 1969.
5. Бублик В.Т., Дубровина А.Н., "Методы исследования структуры полупроводников и металлов". 1978.
6. B.D. Cullity, "Elements of X-ray diffraction", (2nd edition), 1978.

Дополнительная литература

7. M. Birkholz, «Thin Film Analysis by X-Ray Scattering», 2006
8. V. Holý, U. Pietsch, T. Baumbach, «High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers», 1999.

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
 - Сайт международного союза кристаллографии: www.iucr.org
 - База данных структур неорганических соединений icsd.fiz-karlsruhe.de
 - Свободная база данных кристаллических структур www.crystallography.net/cod/
 - База данных порошковой дифракции PDF-2 www.icdd.com/products/pdf2.htm
 - Сайт Кембриджского университета с интерактивными демонстрациями https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic_texture/contents.php

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Цымбаренко Дмитрий Михайлович, к.х.н., tsymbarenko@inorg.chem.msu.ru, 8 495 939 00 29

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации — зачета.
 - Образцы домашних заданий
 1. Найти решетку совпадающих узлов и записать эпитаксиальные отношения для интерфейса $\text{CeO}_2 // \text{R-Al}_2\text{O}_3$.
 2. Какие из рефлексов пленки Si будут доступны для измерения в асимметричной геометрии на $\text{Cu-K}\alpha_1$ излучении и какие будут наблюдаться: (111), (400), (3-11), (220)? Ответ аргументируйте.
 3. Предложите методику установления направления текстуры пленки (00l) LaMnO_3 на подложке (00l) MgO. Рассчитайте необходимые значения углов θ , ω и χ .

4. Постройте прямые полюсные фигуры для отражений (110), (111) и (131) тетрагональных пленок PbTiO_3 ($a = 3.91\text{\AA}$, $c = 4.12\text{\AA}$) в следующих ориентациях:

1) $(001)\text{PbTiO}_3 // (001)\text{MgO}$, $[100]\text{PbTiO}_3 // [100]\text{MgO}$;

2) $(100)\text{PbTiO}_3 // (001)\text{MgO}$, $[010]\text{PbTiO}_3 // [100]\text{MgO}$.

5. Постройте обратную полюсную фигуру поликристаллической пленки Ag на подложке поли-YSZ учитывая следующие значения текстурных коэффициентов: (111) 70%, (002) 20%, (113) 10%.

6. Рассчитайте параметры ромбоэдрической и псевдо-кубической ячеек для ViFeO_3 ($R\text{-}3c$, $a=b=5.588\text{\AA}$, $c=13.867\text{\AA}$).

Предложите возможные варианты эпитаксиального роста ViFeO_3 на подложке (001)YSZ.

● Образцы контрольных вопросов для промежуточной аттестации — **зачета**:

1. Виды текстуры и способы ее обозначения.

2. Решетка совпадающих узлов.

3. Представление обратного пространства. Сфера Эвальда. Вектор дифракции.

4. Устройство рентгеновского дифрактометра для исследования тонких пленок. Четырехкружный гониометр. Обозначения углов.

5. Фокусировка по Брегг-Брентано и по Зеemannу-Болину. Монохроматоры. Щели Соллера. Дефокусировка.

6. Симметричная и асимметричная геометрия съемки. Представление в обратном пространстве.

7. Поглощение рентгеновских лучей, глубина проникновения. Анализ пленок и гетероструктур по глубине. Интенсивности рефлексов ориентированных и не ориентированных пленок.

8. Кривые качания и ϕ -сканирования.

9. Кривые χ -сканирования. Прямые полюсные фигуры.

10. Обратные полюсные фигуры. Метод текстурных коэффициентов.

11. Функция распределения ориентировок.

12. Рентгеновская рефлектометрия.

13. Дифракция отраженных электронов. Аппаратурное оформление метода. Линии Кикучи и ориентация зерна.

14. Метод EDX при анализе тонких пленок и гетероструктур. Недостатки ZAF-коррекции. Послойный анализ.

15. Резерфордское обратное рассеяние. Каналирование. Послойная реконструкция гетероструктур.

● Образцы практических контрольных заданий для промежуточной аттестации — **зачета**:

1. Изложите последовательность анализа текстуры тонкой пленки $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ на подложке (001) SrTiO_3 . Рассчитайте все необходимые углы ориентации. Схематично изобразите вероятные результаты текстурного исследования.

2. По профилю нейтронной дифракции в геометрии θ - 2θ сканирования металлической проволоки в направлении волочения рассчитайте текстурные коэффициенты и постройте обратную полюсную фигуру.
3. Постройте прямую полюсную фигуру для рефлекса (111) пленки (110) $\text{La}_{1-x}\text{Pb}_x\text{MnO}_3$. Рассчитайте необходимые значения углов θ , ω и χ .
4. Выполните индицирование линий Кикучи на картине дифракции отраженных электронов, определите ориентацию зерна в пленке CeO_2 .
5. Расшифруйте спектр Резерфордского обратного рассеяния пленки $\text{Ba}_{0.05}\text{Cd}_2\text{KSi}_2\text{NaO}_4$ на монокристаллической подложке (111) Si. Предложите способ повышению точности определения содержания кислорода.
6. Используя программу STRATAGEM и результаты EDX анализа гетероструктуры $\text{CeO}_2/\text{Y}_2\text{O}_3/\text{Hastelloy}$ рассчитайте толщины слоев.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам, каждый из которых включает теоретические вопросы и практическое контрольное задание (ПКЗ). Уровень знаний аспиранта оценивается на «зачтено», «незачтено». Оценка «зачтено» выставляется, если по шкале оценивания учащийся демонстрирует знания умения и владения, соответствующие категориям 3, 4 и 5. В ходе зачета, проводимого в форме индивидуального собеседования, оценивается степень сформированности «знаниевой» компоненты компетенций УК-2, ПК-1 и ПК-16 (знание современного состояния науки и методов исследования в области тонкопленочных неорганических материалов). Частично сформированность умения выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования (ОПК-1) проверяется при выполнении ПКЗ, их оценка учитывается как одна из составляющих при выставлении зачета.

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
<i>B1 (УК-1)</i> Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Неполное владение отдельными приемами анализа тонких пленок методами рентгеновской дифракции и спектроскопии	Владение шаблонными приемами анализа тонких пленок, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владение методами анализа тонких пленок и гетероструктур	Сформированное систематическое владение методами анализа	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
<i>31 (УК-2)</i> Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методах анализа тонких пленок	Несистемные знания о методах анализа тонких пленок	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных методах анализа тонких пленок и гетероструктур	Сформированные и систематические знания о методах анализа тонких пленок и гетероструктур	Устный опрос в ходе зачета

1	2	3	4	5	6	7
<i>B2 (УК-2)</i> Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований	Отсутствие владения	Владение планированием только отдельных этапов анализа тонких пленок	Владение построением шаблонных планов исследования тонких пленок	Довольно успешное, но не достаточно гибкое владение приемами планирования исследований тонких пленок и гетероструктур	Полное владение технологиями планирования исследований тонких пленок и гетероструктур	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
<i>У1 (ОПК-1)</i> Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение использовать справочные данные и программное обеспечение на отдельных этапах исследования тонких пленок	Шаблонное умение использовать справочные данные и программное обеспечение на всех этапах исследования тонких пленок	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать справочные данные и программное обеспечение для исследования тонких пленок и гетероструктур	Сформированное умение гибко использовать возможности программного обеспечения и справочные данные на всех стадиях исследования тонких пленок и гетероструктур	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
<i>З8 (ПК-1)</i> Знать современные методы исследования тонких пленок неорганических материалов и гетероструктур	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современном состоянии науки в области тонких пленок неорганических материалов и методах их	Неполные представления о современном состоянии науки в области тонких пленок неорганических материалов и методов их	Сформированные, но содержание отдельные пробелы представления о современном состоянии науки в области тонких пленок	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области тонких пленок неорганических материалов и	Устный опрос в ходе зачета

		исследования	исследования	неорганических материалов и гетероструктур и методов их исследования	гетероструктур и методов их исследования	
<i>У6 (ПК-1)</i> Уметь использовать современные методы исследования тонких пленок при решении практических задач неорганической химии	Отсутствие умений	Интуитивный и не всегда верный выбор методов исследования конкретных тонкопленочных материалов	Допускает отдельные ошибки при выборе методов исследования конкретных тонкопленочных материалов	Выбирает правильные методы исследования конкретных тонкопленочных материалов и гетероструктур, но затрудняется предложить научное обоснование своего выбора	Умеет правильно выбрать и обосновать выбор тех или иных методов исследования конкретных тонкопленочных материалов и гетероструктур	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
<i>38 (ПК-16)</i> Знать методы исследования эпитаксиальных отношений на интерфейсах пленка-подложка и пленка-пленка в гетероструктурах	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о методах исследования эпитаксиальных отношений	Неполные представления о методах исследования эпитаксиальных отношениях в тонких пленках	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах исследования эпитаксиальных отношений в тонких пленках	Сформированные систематические представления о методах исследования эпитаксиальных отношений в тонких пленках	Устный опрос в ходе зачета
<i>У5 (ПК-16)</i> Уметь использовать методы	Отсутствие умений	Частично освоенное умение	Шаблонное умение использовать	В целом успешное, но содержащее отдельные	Успешное и систематическое умение исследовать	Выполнение практического

рентгеновской дифракции для определения эпитаксиальных напряжений в тонких пленках		использовать методы рентгеновской дифракции для анализа напряжений	методы рентгеновской дифракции для анализа напряжений в рутинных случаях	пробелы умение использовать методы рентгеновской дифракции для анализа эпитаксиальных напряжений в тонких пленках	напряженное состояние тонкопленочных материалов и гетероструктур	контрольного задания в ходе зачета
--	--	--	--	---	--	------------------------------------