

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
общей и неорганической химии



проф. Семенов В.Н.

10.04.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В. ДВ.01.01 Методы исследования дефектообразования в кристаллах

- 1. Код и наименование направления подготовки:** 04.04.01 Химия
- 2. Профиль подготовки:**
- 3. Квалификация выпускника:** магистр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:**
кафедра общей и неорганической химии
- 6. Составитель программы:** Сушкова Татьяна Павловна, кандидат химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета 13.02.2025, протокол № 10-02
- 8. Учебный год:** 2025/26 **Семестр:** 2

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- знакомство с современными экспериментальными методами наблюдения дефектов в кристаллах;
- освоение расчетных методов оценки концентрации точечных дефектов в кристаллах и энергии их образования.

Задачи учебной дисциплины:

- расширение познаний о закономерностях возникновения дефектов в кристаллах, о взаимосвязи природы и концентрации дефектов и физико-химических свойств кристаллов;
- изучение основных экспериментальных методов наблюдения и определения концентрации точечных и линейных дефектов;
- овладение навыками извлечения информации о природе, концентрации и термодинамических параметрах образования дефектов из результатов экспериментальных измерений;
- освоение методов теоретической оценки концентрации термодинамически равновесных дефектов в кристаллах как функции внешних параметров (температуры, давления).

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Часть, формируемая участниками образовательных отношений Блока 1. Дисциплины (модули). Дисциплина является курсом по выбору и изучается во 2 семестре 1 курса магистратуры.

Для успешного освоения дисциплины обучающиеся должны в достаточной мере владеть знаниями по базовым курсам, изучаемым в бакалавриате: неорганической химии, физической химии, кристаллохимии, физике.

При изучении предшествующих дисциплин магистратуры у обучающихся должны быть частично сформированы компетенции: ПК-1 Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности; ПК-2 Способен применять современные методы анализа, синтеза и моделирования для решения сложных научно-исследовательских задач в химии с целью разработки новых веществ и материалов.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для	ПК-1.1	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач	Уметь: - проводить сбор и анализ научной литературы о процессах дефектообразования в кристаллах

	решения исследовательских задач химической направленности	ПК-1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	
ПК-2	Способен применять современные методы анализа, синтеза и моделирования для решения сложных научно-исследовательских задач в химии с целью разработки новых веществ и материалов	ПК-2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных его стадий	Знать: - основные экспериментальные и расчетные методы определения концентрации точечных и линейных дефектов; Уметь: - выбирать оптимальные методы исследования и оборудование в зависимости от поставленной задачи;
		ПК-2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	
ПК-3	Обладает навыками критической оценки результатов научно-исследовательских работ (НИР) и научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) для определения перспектив их использования в реальных приложениях и продолжения разработок в различных областях химии	ПК-3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знать: - закономерности возникновения дефектов в кристалле, взаимосвязь их природы, концентрации и тех свойств, которые они определяют; Уметь: - теоретически оценивать концентрацию термодинамически равновесных дефектов в кристаллах как функцию внешних параметров (температуры, давления); - определять основные термодинамические параметры (энтальпию, энтропию) процессов дефектообразования; Владеть: - навыками извлечения информации о природе, концентрации и термодинамических параметрах образования дефектов из результатов экспериментальных измерений; - навыками построения диаграмм Броуэра для простых веществ и бинарных соединений .
		ПК-3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час (в соответствии с учебным планом) — 4 / 144 .

Форма промежуточной аттестации зачет с оценкой

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		2
Контактная работа	54	54		

в том числе:	лекции	18	18		
	практические	36	36		
	лабораторные	-	-		
	<i>др. виды (при наличии)</i>	-	-		
Самостоятельная работа		90	90		
в том числе: курсовая работа (проект)		-	-		
Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой					
Итого:		144	144		

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Процессы дефектообразования в кристаллах. Влияние внешних факторов на процессы разупорядочения в кристаллах.	Идеальный кристалл. Дефектообразование в реальных кристаллах. Типы разупорядочения. Номенклатура точечных дефектов. Термодинамика процессов дефектообразования. Зависимость концентрации точечных дефектов в кристалле простого вещества и бинарного соединения от температуры или давления пара летучего компонента. Собственное и примесное дефектообразование в легированных кристаллах простых веществ и химических соединений.	*- в случае перевода студентов на дистанционное обучение все разделы дисциплины могут быть реализованы с помощью электронного курса на образовательном портале ВГУ: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11716
1.2	Экспериментальные методы наблюдения точечных дефектов и дислокаций.	Методы травления и ионной бомбардировки поверхности. Метод декорирования дислокаций. Автоионная микроскопия. Сканирующая туннельная микроскопия. Просвечивающая электронная микроскопия. Силовая электронная микроскопия.	
1.3	Методы определения концентрации точечных дефектов и энергии их образования.	Оценка концентрации и энтальпии образования термических вакансий по термодинамическим характеристикам вещества. Экспериментальное определение концентрации термических вакансий (метод параллельного измерения длины образца и периода решетки при нагревании; спектроскопия аннигиляции позитронов; резистометрия закаленных образцов). Определение энергии образования дефектов нестехиометрии расчетными методами. Метод расчета, основанный на зависимости энтальпии образования дефектов от энтальпии образования вещества. Метод, основанный на связи интеграль-	

		ных термодинамических свойств вещества с энергией образования дефектов. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии экспериментальными методами. Метод, основанный на измерении величины отклонения от стехиометрии как функции температуры. Калориметрический метод. Метод, основанный на измерении электрической проводимости как функции давления и температуры.	
1.4	Влияние дефектов структуры на свойства кристаллов.	Влияние дефектов на оптические, механические, электрические и магнитные свойства кристаллов.	
2. Практические занятия			
2.1	Процессы дефектообразования в кристаллах. Влияние внешних факторов на процессы разупорядочения в кристаллах.	Номенклатура точечных дефектов. Уравнения квазихимических реакций. Построение диаграмм Броуэра для чистых и легированных кристаллов простых веществ и бинарных соединений (на примере InP, InAs, InSb, GaAs). Расчет области гомогенности бинарных полупроводников (InP, InAs, InSb, GaAs), в том числе легированных.	
2.2	Экспериментальные методы наблюдения точечных дефектов и дислокаций.	Экскурсия в Центр коллективного пользования научным оборудованием ВГУ. Знакомство с устройством, возможностями и принципами работы ПЭМ, АСМ, СТМ.	
2.3	Методы определения концентрации точечных дефектов и энергии их образования.	Определение типа и концентрации доминирующих дефектов по экспериментальным данным (решение задач).	
2.4	Влияние дефектов структуры на свойства кристаллов.	Влияние дефектов на оптические, механические, электрические и магнитные свойства кристаллов (семинары).	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Процессы дефектообразования в кристаллах. Влияние внешних факторов на процессы разупорядочения в кристалле.	5	18		30	53
2	Экспериментальные методы наблюдения точечных дефектов и дислокаций.	4	6		20	30
3	Методы определения концентрации точечных дефектов и энер-	5	8		20	33

	гии их образования.					
4	Влияние дефектов структуры на свойства кристаллов.	4	4		20	28
	Итого:	18	36		90	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

В учебном процессе используются следующие формы работы:

- проведение лекций,
- проведение практических занятий,
- внеаудиторная самостоятельная работа студентов.

Студенты знакомятся с теоретическим материалом в процессе лекционного курса, самостоятельно прорабатывая его с использованием рекомендованной учебной литературы и учебно-методических пособий (п. 15).

Целью практических занятий является систематизация и закрепление знаний по изучаемой теме или разделу, формирование умений работать с дополнительными источниками информации, обучение навыкам расчетов концентрации дефектов и энергии их образования по имеющимся литературным данным о физико-химических свойствах веществ, обучение правильному оформлению графического материала и т.п.

Самостоятельная работа предполагает как регулярную подготовку студента к различным формам занятий, так и выполнение отдельных практических заданий, письменных самостоятельных работ, решение задач. Внеаудиторная самостоятельная работа включает проработку конспектов предыдущих лекций, выполнение заданий в рамках подготовки к практическим занятиям, конспектирование материала по темам, выносимым на самостоятельное изучение.

Текущая аттестация обеспечивает проверку освоения учебного материала, приобретения знаний, умений и навыков в процессе аудиторной и самостоятельной работы студентов. Она включает выполнение тестовых заданий к лекциям, письменных контрольных работ. При подготовке к текущей аттестации студенты изучают рекомендованную преподавателем литературу по темам лекционных и практических занятий, осваивают понятийный аппарат и закрепляют теоретические знания. Планирование и организация текущих аттестации знаний, умений и навыков осуществляется в соответствии с содержанием рабочей программы и календарно-тематическим планом с применением фонда оценочных средств. Текущая аттестация является обязательной, ее результаты оцениваются в балльной системе и могут быть учтены при промежуточной аттестации обучающихся.

При подготовке к промежуточной аттестации (зачету с оценкой) необходимо опираться на рекомендованные литературные источники, материал лекций, практических работ, образовательные интернет-ресурсы. Необходимо структурировать весь материал, рекомендуется по каждому вопросу составить краткий опорный конспект, составить словарь ключевых терминов. Для повышения эффективности по мере повторения материала необходимо проводить анализ взаимосвязи различных разделов дисциплины.

Обучение лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха информация по учебной дисциплине предоставляется на бумажном или электронном носителе, допускается присутствие ассистентов и сурдопереводчиков на занятиях. Промежуточная аттестация для таких студентов проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура экзамена может быть реализована дистанционно.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	<i>Семенова Г.В. Химия дефектов : учебное пособие / Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова ; Воронежский гос. университет. – Воронеж : Издат. дом ВГУ, 2017. – 130 с.</i>
2	<i>Фахльман Б. Химия новых материалов и нанотехнологии / Б. Фахльман ; пер. с англ. Д.О. Чаркина и В.В. Уточниковой ; под ред. Ю.Д. Третьякова и Е.А. Гудилина. – Долгопрудный : Интеллект, 2011. – 463 с.</i>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	<i>Ярославцев А.Б. Химия твердого тела / А.Б. Ярославцев.— М. : Науч. мир, 2009. — 322 с.</i>
4	<i>Кнотько А.В. Химия твердого тела / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. — М. : Академия, 2006. — 301 с.</i>
5	<i>Третьяков Ю. Д. Введение в химию твердофазных материалов : учеб. пособие / Ю. Д. Третьяков, В. И. Путляев. — М. : Изд-во Моск. ун-та : Наука, 2006. — 399 с.</i>
6	<i>Синельников Б.М. Физическая химия кристаллов с дефектами : учеб. пособие / Б.М. Синельников. — М. : Высш. шк., 2005. — 134 с.</i>
7	<i>Готтштайн Г. Физико-химические основы материаловедения / Г. Готтштайн. — М. : Бинوم. Лаборатория знаний, 2009. — 400 с.</i>
8	<i>Петров А.Н. Твердые материалы. Химия дефектов. Структура и свойства твердых тел : учеб. пособие / А.Н. Петров. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2008. — 168 с.</i>
9	<i>Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела: в 2-х т. / В.И. Фистуль. — М. : Металлургия, 1995. — Т.1. — 480 с. ; Т.2. — 320 с.</i>

10	Гегузин Я.Е. Очерки о диффузии в кристаллах : учеб. пособие / Я.Е. Гегузин. — Долгопрудный : Интеллект, 2015. — 224 с.
11	Булярский С.В. Термодинамика и кинетика взаимодействующих дефектов в полупроводниках / С.В. Булярский, В.И. Фистуль. — М. : Наука, 1997. — 350 с.
12	Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами / П.В. Ковтуненко. — М. : Высш. шк., 1993. — 352 с.
13	Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. — М. : Мир, 1969. — 654 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет):

№ п/п	Ресурс
1	Электронная библиотека ЗНБ ВГУ http://www.lib.vsu.ru/
2	Электронно-библиотечная система «Лань» https://e.lanbook.com/
3	Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека online» https://biblioclub.ru/
4	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU http://elibrary.ru
5	ЭУМК «Методы исследования дефектообразования в кристаллах» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11716

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Семенова Г.В. Химия дефектов. Задачи и упражнения. Учебно-метод. пособие / Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова, Б.В. Сладкопевцев. — Воронеж : Издат. дом ВГУ, 2019. — 35 с. — URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m19-37.pdf
2	Матвиенко А.А. Типовые задачи по химии твердого тела. Дефекты в кристаллах: учебно-метод. пособие / А.А. Матвиенко. — Новосибирск : Изд-во Новосибирского государственного университета, 2011. — 43 с. — URL: http://window.edu.ru/resource/856/74856
3	Линейные дефекты : учеб.-метод. пособие для вузов / сост.: Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова. — Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2011. — 38 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение:

При реализации дисциплины используются классические образовательные технологии без замены аудиторных занятий (лекций, практических занятий) на ДОТ. Основные типы лекций - вводные лекции (в начале изучения дисциплины) и информационные лекции с визуализацией (мультимедийные презентации). Проведение текущих аттестаций осуществляется в форме устного опроса и в форме письменных контрольных работ. Промежуточная аттестация осуществляется в форме устного собеседования по КИМ. Самостоятельная работа предполагает конспектирование материала и выполнение письменных заданий.

При реализации учебной дисциплины в случае необходимости могут использоваться элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.nj>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебная аудитория (ауд. 359 или 164а): доска меловая, ноутбук, проектор, экран. WinPro8, Office STD, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome, Mozilla Firefox.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся - компьютерный класс (ауд. 271): специализированная мебель. компьютеры с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ВГУ. WinPro8, Office STD, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome, Mozilla Firefox.

19. Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1	Процессы дефектообразования в кристаллах. Влияние внешних факторов на процессы разупорядочения в кристаллах.	ПК-3	ПК-3.1	Контрольная работа №1
2	Экспериментальные методы наблюдения точечных дефектов и дислокаций.	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Устный опрос; Комплект тестов
3	Методы определения концентрации точечных дефектов и энергии их образования.	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Контрольная работа №2; практико-ориентированное письменное домашнее задание
4	Влияние дефектов структуры на свойства кристаллов.	ПК-1 ПК-3	ПК-1.1,1.2 ПК-3.2	Устный опрос
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Перечень вопросов КИМ

20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Она включает в себя несколько форм контроля, направленных на комплексную оценку знаний и навыков студентов.

Аттестация включает устный опрос, который может проводиться как в форме индивидуального опроса, так и фронтальной беседы. Письменные работы представлены контрольными работами и тестами. Контрольные работы позволяют проверить знания и умение студентов применять теоретические концепции на практике. Тестирование используется для быстрой оценки уровня знаний по определенным темам.

Контрольные работы и тесты могут проводиться как в электронной форме, так и на занятиях. Время выполнения этих заданий устанавливается преподавателем. Результаты текущей аттестации могут быть учтены при проведении промежуточной аттестации.

Технология проведения текущей аттестации включает использование электронных ресурсов для организации и контроля процесса, что позволяет автоматизировать оценку и хранение результатов. Мониторинг успеваемости осуществляется через электронный журнал оценок, что позволяет преподавателям и студентам отслеживать прогресс в режиме реального времени.

Примеры контрольных работ

Контрольная работа №1

1. Кристалл простого вещества с шириной запрещенной зоны $\Delta E_0=2,6$ эВ, содержащий собственные вакансии – доноры ($\Delta H_V=0,7$ эВ, $\Delta E_D=0,1$ эВ), легируют из газовой фазы акцепторной примесью ($\Delta H_G=0,8$ эВ, $\Delta E_A=0,2$ эВ). Найти области аппроксимации при использовании приближения Броуэра. Используя метод Броуэра, построить температурную зависимость концентрации дефектов.

2. Напишите процессы дефектообразования и развернутую формулу фазы NiO, если известно, что это фаза с недостатком металла за счет вакансий в катионной подрешетке.

Контрольная работа №2

1. Симмонс и Баллуфи наблюдали, что если стержень из серебра нагревается до температуры плавления, то относительное увеличение длины стержня превышает относительное увеличение параметра решётки на $5,6 \cdot 10^{-5}$. Предполагая, что единственными имеющимися дефектами являются изолированные вакансии, и принимая энтропию образования вакансии равной $1.5 R$ Дж/моль*К, вычислите энтальпию образования вакансий. Температура плавления серебра равна 1233.5 К.

2. Оксид ниобия NbO_x является соединением с широкой областью нестехиометрии ($0.9 < x < 1.15$). Эксперименты показали, что повышение давления кислорода в 16 раз приводит к увеличению электронной проводимости в 2 раза при температуре 500°C. При этом плотность вещества уменьшается с 6.7 до 6.4 г/см³.

а) Какой вид дефектов является преобладающим? Напишите квазихимическое уравнение, объясняющее наблюдаемую зависимость электронной проводимости от давления кислорода.

б) Определите концентрацию дефектов до и после повышения давления кислорода, если известно, что NbO имеет структуру NaCl с параметром решетки $a=0,47$ нм (500°C).

Пример практико-ориентированного домашнего задания

Построить диаграмму Броуэра (зависимость концентрации дефектов от давления пара летучего компонента) для нелегированного кристалла InP (или InAs, InSb, GaAs), ес-

ли известны данные об энтальпиях (эВ) и энтропиях образования собственных точечных дефектов. По полученным результатам установить: 1) какое давление пара летучего компонента необходимо задать, чтобы данный полупроводник обладал n- (или p-) типом проводимости; 2) при каком давлении пара реализуется стехиометрический состав. Необходимые для расчета энтальпии образования дефектов (в эВ) приведены в таблице.

Тип дефекта	InP	InAs	InSb	GaAs
V^{\times}_A	2,47	2,44	2,05	2,31
V^{\times}_B	1,87	1,90	2,05	2,31
B^{\times}_i	1,4	1,50	1,58	1,56
A''_B	0,89	0,57	0,27	0,35
B''_A	0,42	0,33	0,27	0,35

Выполнение контрольных работ и практико-ориентированного домашнего задания оценивается по пятибалльной шкале.

20.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования Воронежского государственного университета. Промежуточная аттестация студентов является основной формой контроля аудиторной работы студентов и проводится с целью установления уровня и качества подготовки студентов ФГОС 3++ и определяет:

- полноту и прочность теоретических знаний;
- сформированность умений применять теоретические знания при решении практических и профессиональных задач;
- сформированность общих и профессиональных компетенций.

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы. Для подготовки к промежуточной аттестации студент также может использовать перечень вопросов, вынесенных на зачет с оценкой, позволяющий оценить уровень сформированности профессиональных компетенций по изучаемой дисциплине.

Промежуточная аттестация проводится в устной или письменной форме. Преподаватель, ответственный за её проведение, вправе задавать студентам дополнительные вопросы по любым разделам учебной дисциплины; все вопросы и ответы фиксируются в листе ответов студента. Время зачета с оценкой регламентируется действующими нормативными документами. Результат промежуточной аттестации заносится преподавателем в лист ответов обучающегося (после чего студент расписывается, подтверждая своё согласие с выставленной оценкой), а также в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Оценка результатов обучения на промежуточной аттестации происходит по следующим показателям:

- знание учебного материала и владение понятийным аппаратом;
- умение связывать теорию с практикой;
- умение иллюстрировать ответ примерами, уравнениями квазихимических реакций, экспериментальными данными.
- Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

По результатам всех выполненных заданий текущего контроля студентам может быть выставлен зачет с оценкой «автоматом»: средняя оценка 3-3,75 - «удовлетворительно», 3,75-4,5 - «хорошо», 4,5-5 - «отлично». В случае неудовлетворительной оценки или в случае несогласия студента с полученной оценкой, проводится зачет в виде устного собеседования по билетам (КИМ) или тестирование по материалам ФОС (п.20.3).

КИМ для проведения зачета в форме устного собеседования по билетам (два вопроса в билете)

Перечень вопросов к зачету:

1. Модель идеального кристалла. Причины возникновения дефектов в реальных кристаллах.
2. Типы собственного разупорядочения.
3. Основные типы атомного структурного разупорядочения в бинарных кристаллах (по Френкелю, по Шоттки, антиструктурное разупорядочение).
4. Равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений. Зависимость концентрации дефектов и величины отклонения от стехиометрии от давления пара летучего компонента. (На примере полупроводника).
5. Равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений. Зависимость концентрации дефектов и величины отклонения от стехиометрии от давления пара летучего компонента. (На примере материала с широкой запрещенной зоной).
6. Термодинамика процесса разупорядочения по Шоттки.
7. Термодинамика процесса разупорядочения по Френкелю.
8. Оценка концентрации термических вакансий по термодинамическим характеристикам вещества.
9. Оценка энтальпии образования термических вакансий по термодинамическим характеристикам вещества.
10. Экспериментальное определение концентрации термических вакансий. Метод параллельного измерения длины образца и периода решетки при нагревании.
11. Экспериментальное определение концентрации термических вакансий. Спектроскопия аннигиляции позитронов.
12. Экспериментальное определение концентрации термических вакансий. Резистометрия закаленных образцов.
13. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии расчетными методами. Метод расчета, основанный на зависимости энтальпии образования дефектов от энтальпии образования вещества.
14. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии расчетными методами. Метод расчета, основанный на связи интегральных термодинамических свойств вещества с энергией образования дефектов.
15. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии экспериментальными методами. Метод, основанный на измерении величины отклонения от стехиометрии как функции температуры.

16. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии экспериментальными методами. Калориметрический метод.
17. Определение энергии образования дефектов нестехиометрии экспериментальными методами. Метод, основанный на измерении электрической проводимости как функции давления и температуры.
18. Методика расчета области гомогенности бинарных фаз.
19. Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Метод химического травления и ионной бомбардировки поверхности кристалла.
20. Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Ионная микроскопия (ионный проектор).
21. Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Сканирующая туннельная микроскопия.
22. Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Атомная силовая микроскопия.
23. Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Просвечивающая электронная микроскопия.
24. Влияние точечных дефектов на оптические свойства кристаллов.
25. Влияние точечных и линейных дефектов на механические свойства кристаллов.
26. Влияние дефектов на магнитные свойства кристаллов.
27. Влияние дефектов на электрические свойства кристаллов.
28. Влияние дефектов на тепловые свойства кристаллов.

Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации, проводимой в традиционной форме по билетам:

Для оценивания результатов обучения на дифференцированном зачете используются следующие показатели:

- владение понятийным аппаратом химии дефектов (теоретическими основами дисциплины),
- способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований,
- применять теоретические знания для решения практических задач по оценке концентрации и энергии образования точечных дефектов в кристаллах,
- знание современных методов экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах.

Для оценивания результатов обучения на дифференцированном зачете используется шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания компетенций	Шкала оценок
Полное соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом химии дефектов (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач по оценке концентрации и энергии образования точечных дефектов в кристаллах, знает основы современных методов экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах.	Отлично
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному из	Хорошо

перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Недостаточно демонстрирует умение применять теоретические знания для решения ситуационных практических задач.	
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует двум из перечисленных показателей. Знание основного учебного материала, предусмотренного программой; ответ неполный, без обоснований, объяснений, с ошибками, которые устраняются по дополнительным вопросам преподавателя.	Удовлетворительно
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем из перечисленных показателей. Знания несистематические, отрывочные; в ответах допущены грубые, принципиальные ошибки, которые не устраняются после наводящих вопросов преподавателя.	Неудовлетворительно

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья зачет проводится с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха промежуточная аттестация проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на зачете может быть увеличено. Для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на экзамене может быть увеличено. Для студентов с нарушениями опорно-двигательного аппарата промежуточная аттестация проводится на общих основаниях, при необходимости процедура зачета может быть реализована дистанционно.

20.3. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения дисциплины

При прохождении обучающимся процедур для оценки достижения результатов обучения разрешается использование:

- непрограммируемого калькулятора;
- справочных материалов (предоставляются Университетом).

Критерии и шкалы оценивания заданий для оценки сформированности компетенций:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

- 1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):
 - 1 балл – указан верный ответ;
 - 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).
- 2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):
 - 2 балла – указан верный ответ;
 - 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).
- 3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):
 - 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
 - 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым) или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность

хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из нескольких подзаданий, верно выполнено 50% таких подзаданий;

- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (получен неправильный ответ, ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки).

Проверяемые компетенции:

ПК-1. Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности.

ПК-1.1. Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач.

ПК-1.2. Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта.

ПК-2. Способен применять современные методы анализа, синтеза и моделирования для решения сложных научно-исследовательских задач в химии с целью разработки новых веществ и материалов.

ПК-2.1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных его стадий.

ПК-2.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.

ПК-3. Обладает навыками критической оценки результатов научно-исследовательских работ (НИР) и научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) для определения перспектив их использования в реальных приложениях и продолжения разработок в различных областях химии.

ПК-3.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ПК-3.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

Закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности)

№	Проверяемая компетенция	Вопрос	Варианты ответов	Правильный ответ
1	ПК-1	Выберите научный журнал, в котором с наибольшей вероятностью можно найти информацию о процессах дефектообразования в полупроводниках.	1. Журнал аналитической химии. 2. Биоорганическая химия. 3. Неорганические материалы. 4. Кинетика и катализ	3
2		При составлении обзора литературы Вы работаете с печатными изданиями. Краткая характеристика печатного издания с точки зрения его содержания и назначения называется:	1. Рецензия. 2. Цитата. 3. Аннотация. 4. Все варианты верны.	3
3		Вы составляете обзор литературы по теме Вашего исследования. Точная выдержка из какого-нибудь текста в данном обзоре называется:	1. Рецензия. 2. Цитата. 3. Реферат. 4. Все варианты верны.	2
4	ПК-2	Вам необходимо построить диаграмму Броуэра (зависимость концентрации дефектов от температуры) для бинарного соединения. Рас-	А) Выбор последовательности расположения областей аппроксимации уравнения электронейтральности по мере увеличения темпе-	БВАГД

		положите в правильном порядке этапы работы (запишите буквы без скобок в нужной последовательности).	ратуры. Б) Составление модели дефектообразования, выбор наиболее вероятных дефектов, запись квазихимических реакций. В) Оценка или поиск в литературе энтальпии и энтропии образования дефектов. Расчет констант равновесия квазихимических реакций. Г) Расчет концентрации дефектов для каждой области аппроксимации. Д) Построение графика.	
5		ТЕМ – аббревиатура названия на английском языке метода исследования, который в России обычно называют:	1. Сканирующая туннельная микроскопия. 2. Просвечивающая электронная микроскопия. 3. Атомная силовая микроскопия. 4. Спектроскопия аннигиляции позитронов.	2
6		Сканирующий туннельный микроскоп можно использовать для исследования:	1. Только проводящих ток материалов. 2. Только диэлектриков. 3. Любых материалов, их электропроводность не имеет значения	1
7	ПК-2	При выращивании кристаллов соединения АВ из расплавов с содержанием компонента В ~ 48-50 мол.% преимущественным типом дефектов в кристаллах являются заряженные вакансии компонента В. Каким типом проводимости будут обладать эти кристаллы?	1. n-тип 2. p-тип 3. Нельзя сделать вывод по приведенным данным	1
8		В 1986 г. Эрнсту Руске была присуждена Нобелевская премия по физике за создание:	1. Автоионного микроскопа. 2. Просвечивающего электронного микроскопа. 3. Атомного силового микроскопа.	2
9		Метод расчета концентрации точечных дефектов в кристалле, основанный на приближении уравнения электронейтральности двумя наибольшими слагаемыми, называется методом...	1. Шоттки 2. Броуэра 3. Крёгера 4. Винка	2
10		Первое прямое экспериментальное определение концентрации вакансий в металлических кристаллах было выполнено методом...	1. Автоионной микроскопии. 2. Спектроскопии аннигиляции позитронов. 3. Параллельного измерения температурной зависимости параметра решетки и линейных размеров образца.	3
11	ПК-3	Вы построили диаграмму Броуэра для арсенида галлия как зависимость концентрации точечных дефектов от давления пара мышьяка. Можно ли по полученным данным определить, при каком давлении пара реализуется стехиометрический состав?	1. Можно 2. Нельзя 3. Иногда можно, в редких случаях.	1
12		Большое количество разнонаправленных дислокаций в кристалле называется:	1. «Заросли дислокаций» 2. «Джунгли дислокаций» 3. «Лес дислокаций»	3
13		Большое количество разнонаправленных дислокаций в кристалле...	1. Увеличивает твердость кристалла 2. Уменьшает твердость кристалла	14

		(выберите правильные ответы, запишите цифры в порядке возрастания, без запятой и пробела)	3. Увеличивает пластичность кристалла 4. Уменьшает пластичность кристалла	
14		Плотность дислокаций в кристалле можно уменьшить путем:	1. Дополнительной механической обработки 2. Равномерного отжига кристалла 3. Электрохимического травления кристалла	2
15		Из литературных данных известно, что полупроводниковое соединение InAs является двусторонней фазой. Вам необходимо получить InAs с проводимостью n-типа. Для этого необходимо:	1. Отжигать кристалл при повышенном давлении пара мышьяка 2. Отжигать кристалл при пониженном давлении пара мышьяка. 3. Выращивать кристалл из нестехиометрического расплава, обедненного индием.	2

Открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

№	Проверяемая компетенция	Вопрос	Правильный ответ
1	ПК-2	Вариант сканирующего зондового микроскопа, предназначенный для измерения рельефа проводящих поверхностей с высоким пространственным разрешением, называется.... (запишите ответ с маленькой буквы в именительном падеже)	сканирующий туннельный микроскоп
2		Измерение времени жизни позитрона в исследуемом образце, содержащем вакансии, лежит в основе метода определения концентрации вакансий, который называется... (запишите ответ с маленькой буквы в именительном падеже)	спектроскопия аннигиляции позитронов
3		Метод определения концентрации вакансий, основанный на измерении при температуре жидкого гелия электрического сопротивления закаленных от высокой температуры кристаллов называется низкотемпературной (вставьте пропущенное слово, записав его с маленькой буквы в творительном падеже)	резистометрией
4		Метод избирательного химического травления основан на повышенной травления в местах выхода дислокаций на поверхность. (вставьте пропущенное слово, записав его с маленькой буквы)	скорости
5		Кинетически устойчивыми линейными дефектами в кристаллах являются (допишите слово с маленькой буквы, во множественном числе)	дислокации
6	ПК-3	Какой доминирующий тип точечных дефектов можно ожидать у фазы, состав которой описывается формулой $ZnO_{0,98}$, если известно, что плотность ее повышена по сравнению со стехиометрическим оксидом цинка? При записи используйте символику Крегера без указания заряда дефекта.	Zn_i
7		Какой доминирующий тип точечных дефектов можно ожидать у фазы, состав которой описывается формулой $InSb_{1,005}$, если известно, что плотность ее понижена по сравнению со стехиометрическим антимонидом индия? При записи используйте символику Крегера без указания заряда дефекта.	V_{In}
8		Для избирательного химического травления ионных кристаллов в качестве травителя обычно используется (вставьте пропущенное слово, записав его с маленькой буквы)	вода

9	Формулу оксида урана (IV) можно представить в виде: 1) $UO_{2,18}$ или 2) $U_{0,91}O_2$. Какая из этих формул правильно отображает дефектность кристалла, если известно, что плотность образцов увеличена по сравнению со стехиометрическим составом? Какой тип проводимости можно ожидать у этого соединения? В ответе укажите цифру и латинскую букву через запятую	1,р
---	--	-----

Открытые задания (мини-кейсы, задачи, средний уровень сложности):

1	Пренебрегая энтропийным сомножителем, приближенно оцените энтальпию образования одной вакансии в металле, если экспериментально определенная равновесная концентрация вакансий при 927°C равна 10^{-5} мол.д. Ответ запишите в электронвольтах (эВ), округлив до десятых (только число, без указания единиц измерения).	1,2
2	В меди, закаленной от температуры 873 K , содержится $1,1 \cdot 10^{-7}$ (мол.д.) вакансий. Какую температуру закалки следует выбрать, чтобы концентрация вакансий возросла на 2 порядка? В ответе укажите только число, округлив до целого (без указания единиц измерения).	1230
3	При температуре 922 K равновесная концентрация вакансий в магнии равна $7,2 \cdot 10^{-4}$. Пренебрегая энтропийным сомножителем, приближенно оцените равновесную концентрацию вакансий при температуре 25°C . В ответе укажите только число, без указания единиц измерения.	$1,6 \cdot 10^{-10}$
4	Электропроводность нестехиометрического оксида Cu_2O увеличивается с повышением давления кислорода по закону $\sigma \sim P^{1/8}$. Напишите квазихимическое уравнение процесса дефектообразования, объясняющее наблюдаемую зависимость проводимости от давления кислорода.	$\frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) \leftrightarrow \text{O}_\text{O}^\times + 2V_{\text{Cu}}' + 2h^\bullet$

Максимальная сумма баллов – 53.

Набрано баллов: 18-32 – оценка «удовлетворительно»

33-42 – оценка «хорошо»

43-53 – оценка «отлично»

Задания раздела 20.3 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины.

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Направление подготовки _____ 04.04.01 Химия _____

Дисциплина Б1.В. ДВ.01.01 Методы исследования дефектообразования в кристаллах

Профиль подготовки _____

Форма обучения _____ очная _____

Учебный год _____ 2025/26 _____

Ответственный исполнитель
Доцент кафедры общей
и неорганической химии _____

Сушкова Т.П. ____ 20__

СОГЛАСОВАНО

Куратор ООП

по направлению/специальности _____ Шихалиев Х.С. ____ 20__

Начальник отдела обслуживания ЗНБ _____ ____ 20__

Программа рекомендована НМС _____ химического факультета _____

протокол № 10-02 от 13.02.2025 г.