

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Дифракційні методи досліджень
для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 104 Фізика та астрономія
освітній ступінь Бакалавр
освітня програма "Фізичне матеріалознавство/неметалічне матеріалознавство"
вид дисципліни Вибіркова *ФК 2 3.1*

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	восьмий
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: професор Семенко Михайло Петрович

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: Семенко Михайло Петрович, д.ф.-м.н., професор, професор кафедри фізики металів.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Курилюк В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол від « 20 » травня 2022 р. за № 8

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «10» червня 2022 року за № 11

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх.О.Я.)
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – отримання глибоких та систематичних знань у галузі розсіювання рентгенівських променів кристалічними та некристалічними тілами, засвоєння фізичних принципів та методів рентгеноструктурного аналізу полікристалів і рентгенографії, вивчення основних експериментальних методів, що застосовуються у рентгенографії полікристалів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки та статистичної фізики, фізики конденсованого стану, кристалографії, курсів вищої математики.
2. Вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів загальної фізики, квантової механіки та статистичної фізики, фізики конденсованого стану, кристалографії для розв'язку практичних задач.
3. Володіти елементарними навичками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференціальних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.

3. Анотація навчальної дисципліни: Вибіркова навчальна дисципліна «Дифракційні методи дослідження» є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня "бакалавр". Зокрема її фундаментальні закони та поняття про неупорядкованість широко використовуються в ряді важливих дисциплін, які є складовими таких розділів фізики як фізика та теорія твердого тіла. Основна задача – розглянути особливості дифракції рентгенівських променів на впорядкованих та неупорядкованих структурах. Показати можливість визначення інформації про внутрішню будову в першу чергу кристалічних, а також різних неупорядкованих, середовищ. Розглянути специфіку впливу різних структурних станів на особливості дифракційних спектрів. Результатом навчання є оволодіння знаннями про особливості дифракції на конденсованому середовищі та оволодіння методами встановлення параметрів структури конденсованого стану. Методи викладання: лекції, лабораторні роботи, самостійна робота. Методи оцінювання: модульні контрольні роботи, усне опитування, захист лабораторних робіт, захист завдань для самостійного опрацювання, іспит.

4. Завдання (навчальні цілі) – оволодіння фізичними принципами розсіювання X-променів у рамках кінематичного наближень, методами аналізу атомної структури конденсованого стану та визначення симетрії і метрики елементарної комірки, основами техніки дифракційного експерименту.

Згідно вимог проекту Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти (шостий рівень НРК України), галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОПП "Фізичне матеріалознавство/неметалічне матеріалознавство" дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних *компетентностей*:

інтегральної:

- Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу. (ЗК1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК2).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт. (ЗК8)
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків. (ЗК9).
- Здатність зберігати та примножувати моральні, культурні, наукові цінності і досягнення суспільства на основі розуміння історії та закономірностей розвитку предметної області, їх місця у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку (ЗК15).

фахових:

- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії. (ФК1).
- Здатність оцінювати порядок величин у різних дослідженнях, так само як точності та значимості результатів. (ФК3).
- Здатність працювати із науковим обладнанням та вимірювальними приладами, обробляти та аналізувати результати досліджень. (ФК4).
- Здатність виконувати теоретичні та експериментальні дослідження автономно та у складі наукової групи. (ФК8).
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації. (ФК9).
- Здатність аналізувати світові тенденції розвитку фізики для вибору власної освітньої траєкторії. (ФК15).

5. Результати навчання за дисципліною:

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знати фізику рентгенівського випромінювання.	лекції, самостійна робота	Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання	10
1.2	Знати теорію розсіювання рентгенівських променів.	лекції, самостійна робота	Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік	10
1.3.	Знати основи аналізу атомної структури конденсованого стану та визначення симетрії і метрики елементарної комірки	лекції, самостійна робота	Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік	10
1.4	Знати основи техніки дифракційного експерименту	лекції, самостійна робота	Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного	10

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

			опрацювання, залік	
2.1	Вміти працювати з рентгенівською технікою.	лабораторні роботи, реферативні сповіщення	Захист лабораторних робіт, захист завдань для самостійного опрацювання	30
2.2	Вміти встановлювати тип симетрії та метрику найпростіших елементарних комірок.	лабораторні роботи, реферативні сповіщення	Захист лабораторних робіт, захист завдань для самостійного опрацювання	30
4.1	Знати і розуміти основні вимоги техніки безпеки при проведенні експериментальних досліджень, зокрема правила роботи з джерелами іонізаційного випромінювання	лабораторні роботи	Захист лабораторних робіт	допуск до виконання лаб. робіт

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни							
Програмні результати навчання	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	4.1
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики.	+	+	+				
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.		+	+	+	+		
ПРН4. Вміти застосовувати базові математичні знання, які використовуються у фізиці та астрономії: з аналітичної геометрії, лінійної алгебри, математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірностей та математичної статистики, теорії груп, методів математичної фізики, теорії функцій комплексної змінної, математичного моделювання.		+	+	+		+	+
ПРН14. Знати і розуміти основні вимоги техніки безпеки при проведенні експериментальних досліджень, зокрема правила роботи з певними видами обладнання та речовинами, правила захисту персоналу від дії різноманітних чинників, небезпечних для здоров'я людини.			+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання: (max/min)

1. Контрольна робота: РН 1.1-1.4 – 17 балів / 11 балів

3. Усне опитування та захист завдань для самостійного опрацювання – 3 бали / 1 бал
3. Лабораторні роботи (4 робіт) : РН 2.1-2.,4.1 – 17 балів / 11 балів
4. Підготовка рефератів: РН 2.1 – 3 балів / 1 бал

- підсумкове оцінювання у формі іспиту.

Іспит проводиться в письмовій формі. Кожен екзаменаційний білет містить два теоретичні питання з необхідністю розгорнутої відповіді. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом за складання іспиту дорівнює 60. Для отримання позитивної оцінки, оцінка за іспит не може бути меншою 36 балів. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 24 бали. Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом лабораторних робіт та написання відповідної якості рефератів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота проводяться по завершенні тематичних лекцій.

Захист звітів лабораторних робіт та доповіді по рефератам проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	С/Р
Змістовий модуль 1. Фізика рентгенівського випромінювання та деякі застосування рентгенівської дифракції				
1	Вступ	1		
2	Тема 1. Особливості техніки рентгенівського аналізу. Гальмівні спектри Х-променів. Емісійні характеристичні спектри Х-променів. Джерела рентгенівського випромінювання. Механізми ослаблення Х-променів. Прилади для дифракційних досліджень та їх будова.		2	
3	Тема 2. Кінематична теорія розсіювання Х-променів та методи рентгеноструктурного дослідження полікристалів Формування дифракційних максимумів тривимірним періодичним середовищем. Розсіювання Х-випромінювання вільним електроном, атомом, тривірним періодичним середовищем. Формула Лауе та Вульфа-Брега.	1		2
4	Тема 3. Розсіювання Х-променів складними ґратками. Розсіяння рентгенівських променів непримітивною елементарною коміркою. Структурна амплітуда та структурний множник. Розрахунок структурного множника для упорядкованих структур. Правила погасання. Псевдопогасання. Множник повторюваності. Вплив теплових коливань атомів на інтенсивність дифракційних максимумів. Температурний множник. Вплив параметрів міжатомного зв'язку на фактор Дебая-Валлера. Теплове дифузне розсіювання Х-випромінювання. Вплив дефектів на інтенсивність лифракційних макчимумів. Статичний фактор Дебая-Валлера. Дифузне розсіювання Х-випромінювання на дефектах кристалічної структури .	2		4
5	Тема 4. Інтерпретація порошкових рентгенограм кристалів кубічної, тетрагональної та гексагональної сингоній. Інтерпретація порошкових рентгенограм, отриманих від кристалів, що належать до кубічної сингонії. Індексуювання рентгенівських дифракційних спектрів полікристалічних речовин тетрагональної та гексагональної сингонії.	2		4
6	Тема 5. Аналіз структури рідин та аморфних речовин. Інтенсивність розсіювання рентгенівського випромінювання простими (одноатомними) рідинами. Функція радіального розподілу атомів та її аналіз. Кутовий розподіл інтенсивності розсіювання рентгенівського випромінювання багатокомпонентними розплавами та аморфними сплавами Радіальні функції розподілу атомів та методи перетворення Фур'є. Парціальні функції розподілу атомів. Експериментальні методи дослідження структури некристалічних речовин. Особливості атомної структури аморфних металів.	2		4
7	Тема 6. Рентгенографічне визначення дисперсності полікристалічних речовин. Метод підрахунку плям на дебаєвському кільці. Метод визначення розмірів кристалітів за ефектом первинної екстинкції. Визначення розмірів кристалітів за дифракційним розмиттям ліній (формула Селякова-Шерера). Малокутове розсіювання Х-променів. оздільне визначення розмірів кристалітів та мікронапружень методом апроксимації. Виділення фізичної компоненти ширини дифракційної лінії методом Стокса. Метод гармонічного аналізу профілю дифракційних максимумів. Метод моментів.	2		4
Перелік лабораторних робіт				
	Робота 1. Техніка безпеки при роботі з джерелами іонізаційного випромінювання.		1	2

	Робота 2. Будова, параметри та режими роботи рентгенівських трубок.		1	2
	Робота 3. Ознайомлення з будовою та роботою рентгенівського дифрактометра ДРОН-4.		1	2
	Робота 4. Визначення коефіцієнту поглинання фольг та підбір селективно поглинаючого фільтру.		2	3
	Робота 5. Одержання та обробка дифрактограм кубічних кристалів.		3	6
	Робота 6. Визначення типу твердого розчину.		2	4
	Робота 7. Визначення параметру дальнього порядку з порівняння структурних та надструктурних ліній.		3	6
	Робота 8. Рентгенографічне визначення макронапружень.		3	6
	Робота 9. Роздільне визначення розміру кристалітів та мікронапружень методом апроксимації		3	6
	Робота 10. Роздільне визначення мікронапружень та розміру блоків когерентного розсіювання методом гармонічного аналізу профілю дифракційної лінії.		3	6
	Робота 11. Рентгенівський аналіз текстур.		2	4
	Робота 12. Якісний та кількісний фазовий аналіз.		3	6
	Робота 13. Використання програмних пакетів для обробки дифракційних спектрів (на прикладі програмного пакету FullProf).		3	6
	ВСЬОГО	10	30	80

Загальний обсяг **120 год.¹**, в тому числі:

Лекцій – **10 год.**

Лабораторні – **30 год.**

Самостійна робота - **80 год.**

¹ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна:

1. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. Киев Наукова думка, 1976
2. C. Suryanarayana, M. Grant Norton. X-Ray Diffraction. A Practical Approach. - Springer Science+Business Media, LLC. – 1998. – 273 с.
3. Y. Waseda, E. Matsubara, K. Shinoda. X-Ray Diffraction Crystallography. Introduction, Examples and Solved Problems. – Springer – 2011-322 p.
4. Русаков А.А. Рентгенография металлов. М.: Атомиздат.-1977.
5. Уманский Я.С. и др. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия.- 1982.
6. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: ИЛ.- 1950.
7. Дифракционные и микроскопические методы в материаловедении. Под ред. С.Амелинка, Р.Геверса и Дж.Ван Ландё. М.: Металлургия.-1984.
8. Гриневич Г.П., Захаренко М.І. Методичні вказівки до лабораторних робіт з курсу “Рентгенографія матеріалів”. Київ: РВЦ “Київський університет”.- 1997.
9. В.А.Макара, М.І.Захаренко, М.П. Семенко. Дифракційні методи дослідження твердого тіла. Лабораторний практикум для студентів фізичного ф-ту. Ч. 1. Основи рент. техніки. Київ, ВЦ “Київський ун-т”, 1999.
10. Захаренко М.І., Семенко М.П., „Методи структурного аналізу” (методичні вказівки до лабораторних робіт з курсу „Дифракційні методи дослідження конденсованого стану” Київ.- 2012.
11. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1972.
12. Пинскер З.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах М.: Наука. 1974

Додаткова:

1. Горелик С.С. и др. Рентгенографический и электроннооптический анализ. М.: Металлургия.- 1970.
2. Уманский Я.С., Золина З.К. Сборник задач по рентгеноструктурному анализу. М.: изд-во МГУ.- 1975.
3. Вегман Е.Ф. и др. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография. М.: Металлургия.- 1990.
4. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. М.: Мир.- 1972.
5. Петренко П.В. Дифракційні методи структурного аналізу. Кінематичне наближення. К.:ВЦП «Київський університет». – 2005.