



Силабус освітнього компонента

Програма навчальної дисципліни



Методи структурного аналізу

Шифр та назва спеціальності

105 – Прикладна фізика та наноматеріали

Інститут

ННІ Комп'ютерного моделювання, прикладної фізики та математики

Освітня програма

Прикладна фізика та наноматеріали для енергетики, медицини, радіоелектроніки та телекомунікацій

Кафедра

Фізики металів та напівпровідників (165)

Рівень освіти

бакалавр

Тип дисципліни

Профільна підготовка

Семестр

6, 7

Мова викладання

Українська

Викладачі, розробники



Малихін Сергій Володимирович

Seryii.Malykhin@khp.edu.ua

Доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики металів та напівпровідників НТУ «ХП».

Досвід роботи – 40 років.

Автор понад 150 наукових та навчально-методичних праць.

Провідний лектор з дисциплін: «Фізика та хімія фазових перетворень», «Фізика конденсованого стану», «Методи структурного аналізу», "Кристалографія"

[Детальніше про викладача на сайті кафедри](#)

Загальна інформація

Анотація

В даному курсі на протязі двох семестрів викладаються основні відомості про структуру твердих тіл, фізику рентгенівських променів, дифракцію електромагнітних хвиль і застосування методів рентгеноструктурного і електронографічного аналізу для вирішення завдань прикладної фізики, фізики твердого тіла та матеріалознавства. Він спрямований на отримання знань про методи дослідження структури, субструктури і залишкових напружень у масивних і наноструктурованих кристалах і квазікристалах. Викладаються прийоми реєстрації та обробки дифракційної картини. Курс призначений для студентів фізичних, інженерно – технічних і матеріалознавчих спеціальностей вищих навчальних закладів.

Мета та цілі дисципліни

Мета вивчення та засвоєння матеріалу з навчальної дисципліни «Методи структурного аналізу» полягає в отриманні студентами в кінцевому результаті потрібних знань та навичок щодо методів дослідження реальної внутрішньої будови твердого тіла (структури, субструктури та напруженого стану): класичних кристалів, аморфних твердих та рідинних речовин, а також штучних надструктур, нанокристалів, кластерних матеріалів, квазікристалів тощо, при вирішенні

прикладних задач матеріалознавства та для належної підготовки спеціалістів до майбутньої діяльності.

Формат занять

Лекційні, лабораторні та практичні заняття та консультації. Підсумковий контроль - іспит

Компетентності

ЗК1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК2. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК4. Здатність спілкуватися іноземною мовою.

ЗК6. Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК8. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК10. Навички здійснення безпечної діяльності.

СК1. Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів.

СК2. Здатність брати участь у плануванні і виконанні експериментів та лабораторних досліджень властивостей фізичних систем, фізичних явищ і процесів, обробленні й презентації їхніх результатів.

СК4. Здатність брати участь у впровадженні результатів досліджень та розробок.

СК8. Здатність працювати в колективах виконавців, у тому числі в міждисциплінарних проектах.

Результати навчання

Р01. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

Р02. Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів.

Р03. Застосовувати ефективні технології, інструменти та методи експериментального дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали, при розв'язанні практичних проблем прикладної фізики.

Р04. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій.

Р06. Відшукувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації.

Р07. Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики

Р09. Презентувати результати досліджень і розробок фахівцям і нефахівцям, аргументувати власну позицію..

Обсяг дисципліни

Загальний обсяг дисципліни 10 кредитів (300 год.), з них лекції – 72 год, лабораторні заняття – 56 год., самостійна робота –172 год

Передумови вивчення дисципліни (пререквізити)

«Фізика та хімія фазових перетворень», " Фізика", "Кристалографія», "Дефекти кристалічної будови"

Особливості дисципліни, методи та технології навчання

Лекції проводяться інтерактивно з використанням мультимедійних технологій.

Програма навчальної дисципліни

Теми лекційних занять

Розділ 1. Фізика рентгенівських променів.

Тема 1. Природа та одержання рентгенівських променів.

Природа рентгенівських променів та їх властивості. Використання рентгенівських променів. Джерела рентгенівського випромінювання. Класифікація та характеристика рентгенівських трубок. Конструкція рентгенівської трубки. Електрична та оптична характеристика рентгенівських трубок. Конструкція рентгенівської трубки. Електрична та оптична характеристика рентгенівських трубок. Методи реєстрації та виміру інтенсивності рентгенівського випромінювання.

Тема 2. Рентгеновські спектри.

Спектри рентгенівського випромінювання. Інтенсивність, спектральна інтенсивність рентгенівських променів. Поява та основні закономірності суцільного спектра. Розподіл суцільного спектру в просторі. Залежність інтенсивності суцільного спектру від сили струму та напруги, що підведені до трубки, а також від порядкового номеру елемента аноду. Виникнення характеристичного спектру та його закономірності. Систематика ліній. Правило відбору та діаграма переходів. Закон Мозлі. Форма і ширина ліній. Оже-ефект.

Тема 3. Взаємодія рентгенівських променів з речовиною.

Явище дзеркального відбиття, заломлення, поглинання та розсіювання рентгенівських променів. Основний закон послаблення. Коефіцієнти послаблення. Шар половинного послаблення. Дійсне поглинання. Фільтрація рентгенівського випромінювання. Вибір селективно поглинаючих фільтрів. Розсіювання рентгенівських променів одиничним електрическим диполем. Класична теорія Томсона. Пружне розсіювання. Непружне розсіювання. Ефект Комптона. Інтенсивність розсіяної хвилі та індикатриса розсіювання.

Розділ № 2. Теорія розсіяння рентгенівських променів кристалами.

Тема 4. Кінематична та динамічна теорії розсіяння.

Галузь вживання кінематичної та динамічної теорій розсіяння. Основні поняття, визначення та принципи дифракції. Визначення вектора дифракції та його фізична суть. Розсіяння рентгенівських променів атомом. Вплив розподілу електронної густини на амплітуду та інтенсивність когерентного розсіяння. Атомний фактор розсіяння, атомний множник. Оптичні принципи дифракції. Розсіяння атомним рядом. Умови дифракції. Амплітуда рентгенівських променів, розсіяних атомною площиною та рядом площин. Форма та інтенсивність дифракційного максимуму ідеального кристалу.

Тема 5. Кінематична дифракція рентгенівських променів тривимірною решіткою

Інтерференційна функція для 3х-мірної комірки, її головні та побічні максимуми. Інтерференційне рівняння у формі Лауе, Евальда, Брегга. Їх взаємозв'язок та геометричний зміст. Розсіяння рентгенівських променів кристалом малого розміру. Інтегральна інтенсивність та форма вузлів зворотної решітки. Співвідношення Селякова-Шеррера. Множник інтегральної інтенсивності. Інтерференція рентгенівських променів кристалами з складними елементарними комірками. Структурна амплітуда та структурний множник. Решітки Браве та їх зв'язок з загальними законами погасання. Вплив теплових коливань атомів на інтенсивність дифракційних максимумів. Температурний фактор Дебая-Валлера. Множник поглинання. Додаткові множники інтенсивності розсіяння рентгенівських променів полікристалами.

Розділ 3. Методи структурного аналізу.

Тема 6. Методи дослідження монокристалів

Принцип методу нерухомого монокристала в поліхроматичному випромінюванні. Індексація лауєграми за допомогою гномінейної проекції. Можливості та обмеження методу. Принцип методу монокристала, що обертається в монохроматичному випромінюванні. Індексація шарових ліній. Можливості методу.

Тема 7. Методи дослідження полікристалів

Принцип полікристалічного методу. Фотографічний засіб реєстрації дифракційної картини. Можливості методу. Спосіб плоского зразка, його особливості. Дифрактометричний засіб реєстрації дифракційної картини в полікристалічному методі. Умови фокусування за Брегом-Брентано. Порівняння методу плоского зразка та на дифрактометрі. Індксація дифракційних картин кубічних кристалів. Визначення періоду кристалічної решітки. Графічні засоби індксації рентгенограм та дифрактограм тетрагональних та гексагональних кристалів. Визначення періодів решітки полікристалів тетрагональної та гексагональної решітки.

Розділ 4. Методи структурного аналізу в матеріалознавстві.

Тема 8. Рентгенівський фазовий аналіз.

Якісний фазовий аналіз; його задача та етапи його проведення. Процедура ідентифікації фаз. Кількісний фазовий аналіз; його задача та основні співвідношення. Найбільш вживані способи кількісного фазового аналізу.

Тема 9. Рентгенівський аналіз діаграм фазового стану.

Визначення типу твердого розчину. Концентраційна залежність періоду решітки для 3-х типів твердих розчинів. Правило Вегарда. Побудова кривих обмеженого розчину на діаграмах стану двохкомпонентних сплавів: способи "зникаючої" фази та прецизійного визначення періодів решітки.

Тема 10. Рентгенографічне дослідження текстури в полікристалах.

Типи текстур, їх визначення. Вісь текстури та вісь орієнтації. Фотографічний спосіб визначення аксіальної текстури: розрахунковий спосіб. Співвідношення Поляні. Фотографічний спосіб визначення аксіальної текстури: експериментальний спосіб. Зйомка під нахилом. Дифрактометричний спосіб визначення аксіальної текстури в конденсованих плівках та покриттях. Спосіб зворотних полюсних фігур

Тема 11. Рентгенографія визначення внутрішніх макронапружень.

Класифікація внутрішніх напружень, їх рентгенографічне проявлення. Умови формування макронапружень. Види внутрішніх макронапружень в залежності від чинників їх утворення. Основні співвідношення для вимірювання макронапружень. Спосіб суми головних напружень. б. Спосіб зйомок під нахилом: $\sin^2\psi$ - спосіб.

Тема 12. Рентгенографічне вивчення характеристик субструктури в пластично деформованих металах і сплавах.

Класифікація дефектів в кристалах, що впливають на ширину дифракційних ліній: мікроскопічний та феноменологічний підхід. Виведення згортки функцій. Виключення інструментального ефекту та визначення істинного дифракційного розширення. Розподіл дифракційного розширення на частки, що обумовлені розміром зон когерентного розсіяння та мікродеоформацій. Спосіб апроксимації для визначення характеристик субструктури по двом лініям по Коші та по Гаусу.

Теми практичних занять

Практичні роботи в рамках дисципліни не передбачені.

Теми лабораторних робіт

1. Рентгенівські апарати та трубки для структурного аналізу. Методи реєстрації рентгенівського випромінювання
2. Визначення довжини хвилі рентгенівського випромінювання трубки на дифрактометрі
3. Визначення товщини фольги за послабленням рентгенівських променів.
4. Метод монокристала, що обертається в мо-нохроматичному випромінюванні
5. Зйомка та розшифровка рентгенограм та дифрактограм полікристалів кубічної та гексагональної системи.
6. Якісний фазовий аналіз суміші кристалічних речовин
7. Визначення індксів аксіальної текстури.

8. Рентгенографічне визначення макронапружень.
9. Визначення розміру зон когерентного розсіяння та величини мікродеформацій.

Самостійна робота

1. Методи реєстрації та виміру інтенсивності рентгенівського випромінювання
2. Фотографічний метод реєстрації
3. Вимірювання інтенсивності за допомогою лічильників. Устрій і принцип дії лічильників рентгенівського випромінювання
4. Визначення значення структурного фактора з урахуванням атомного та встановлення закону погасання для структур магнія, алмаза та сфалериту.
5. Проведення розрахунків кількісного аналізу для заданої суміші речовин.
6. підготовка до заліку та іспиту.

Література та навчальні матеріали

Основна література

1. С. І. Мудрий, Ю. О. Кулик, А.С. Якимович. Рентгеноструктурний аналіз у матеріалознавстві: навч.-метод. посіб.:– Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2017. –226 с.
2. Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij . Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials Springer.- 2005, 713р.
3. С.М. Данильченко, В. М. Кузнецов, І. Ю. Проценко Рентгенодифракційні методи дослідження кристалічних матеріалів: навчальний посібник / .- Суми: Сумський державний університет, 2019.- 135 с.
4. В. П. Казіміров, Е. Б. Русанов. Рентгенографія кристалічних матеріалів : навч. посіб. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2016. – 287 с.
7. Georg Will. Powder Diffraction. Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg, 2006, 224 p.
5. С.О. Колінько, Т.І. Бутенко, Ващенко В.А. Конспект лекцій з дисципліни «Фізика конденсованого стану матеріалів» М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол. ун-т. – Черкаси : ЧДТУ, 2021. – 175 с.

Додаткова література

1. Структура і фізичні властивості твердого тіла: лабораторний практикум / О. Г. Алавердова [та ін.] ; ред. Л. С. Палатник. - Київ : Вища шк., 1992. - 311 с.
2. М.В. Карпець, С.І. Сидоренко, А.П. Бурмак. Сучасні експериментальні методи аналізу низькорозмірних структур:Лабораторний практикум: навч. посіб. –К.: КПІ ім. Ігоря Сікорського; – 2021. – 113 с.

Система оцінювання

Критерії оцінювання успішності студента та розподіл балів

Відвідування лекцій - 20 балів.

Виконання завдання на самостійну роботу - 20 балів.

Оцінка виконання контрольних робіт - 10 балів.

Оцінка виконання та здавання лабораторних робіт - 10 балів.

Оцінка іспиту - 40 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів	Національна оцінка	ECTS
90–100	Відмінно	A
82–89	Добре	B
75–81	Добре	C
64–74	Задовільно	D
60–63	Задовільно	E
35–59	Незадовільно (потрібне додаткове вивчення)	FX
1–34	Незадовільно (потрібне повторне вивчення)	F

Норми академічної етики і політика курсу


Студент повинен дотримуватися «Кодексу етики академічних взаємовідносин та доброчесності НТУ «ХПІ»: виявляти дисциплінованість, вихованість, доброзичливість, чесність, відповідальність. Конфліктні ситуації повинні відкрито обговорюватися в навчальних групах з викладачем, а при неможливості вирішення конфлікту – доводитися до відома співробітників дирекції інституту. Нормативно-правове забезпечення впровадження принципів академічної доброчесності НТУ «ХПІ» розміщено на сайті: <http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/akademichna-dobrochesnist/>

Погодження

Силабус погоджено



Завідувач кафедри
Сергій МАЛИХІН



Гарант ОП
Сергій КОЗЛОВ