

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Дифракційні методи дослідження конденсованого стану
для студентів**

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 104 Фізика та астрономія
освітній ступінь Бакалавр
освітня програма Фізика
спеціалізований
вибірковий блок Фізика металів
вид дисципліни Вибіркова *РКД*

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	шостий
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладачі: професор Семенко Михайло Петрович

Пролонговано: на 20 22 / 20 22 н.р. *(підпис)* « 01 » 01 20 22 р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20 / 20 н.р. () « » 20 р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2021

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

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Курилюк В.В.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 11 від «10» червня 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Оліх О.Я.)

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 конденсованого стану» 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 теорії 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, залік.

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 Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОПП "Фізика", спеціалізований вибірковий блок «Фізика металів»), дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних *компетентностей*:

інтегральної:

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

загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу. (ЗК1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК2).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК3)
- Здатність приймати обґрунтовані рішення (ЗК5).
- Навички здійснення безпечної діяльності (ЗК7).
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК12).

фахових:

- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії. (ФК1).
- Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів. (ФК2).
- 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 моделювати фізичні системи та астрономічні явища і процеси. (ФК6).
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту. (ФК7).
- Здатність виконувати теоретичні та експериментальні дослідження автономно та у складі наукової групи (ФК8).
- Розвинуте відчуття особистої відповідальності за достовірність результатів досліджень та дотримання принципів академічної доброчесності разом з професійною гнучкістю (ФК11).
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК14).

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.	<i>лекції, самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік</i>	15
1.2	Знати теорію розсіювання рентгенівських променів.	<i>лекції, самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік</i>	15
1.3.	Знати основи аналізу атомної структури конденсованого стану та визначення симетрії і метрики елементарної комірки	<i>лекції, самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік</i>	15

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

1.4	Знати основи техніки дифракційного експерименту	<i>лекції, самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, усне опитування, захист завдань для самостійного опрацювання, залік</i>	15
2.1	Вміти працювати з рентгенівською технікою.	<i>лабораторні роботи, реферативні сповіщення</i>	<i>Захист лабораторних робіт, захист завдань для самостійного опрацювання</i>	20
2.2	Вміти встановлювати тип симетрії та метрику найпростіших елементарних комірок.	<i>лабораторні роботи, реферативні сповіщення</i>	<i>Захист лабораторних робіт, захист завдань для самостійного опрацювання</i>	20
4.1	Знати і розуміти основні вимоги техніки безпеки при проведенні експериментальних досліджень, зокрема правила роботи з джерелами іонізаційного випромінювання	<i>лабораторні роботи</i>	<i>Захист лабораторних робіт</i>	допуск до виконання лаб. робіт

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

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни						
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	4.1
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні 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 та/або астрономії.	+	+	+				
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.		+	+	+			
ПРН7. Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних досліджень відповідно до спеціалізації.		+	+	+		+	+
ПРН9. Мати базові навички проведення теоретичних та/або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики або астрономії, що виконуються індивідуально (автономно) та/або у складі наукової групи.			+	+	+	+	
ПРН13. Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями		+	+			+	+

прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень.						
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 1 за темами 1-6: РН 1.1 – 17 балів / 11 балів
2. Контрольна робота 2 за темами 7-12: РН 1.2-1.4 – 17 балів / 11 балів
3. Усне опитування та захист завдань для самостійного опрацювання – 6 бали / 2 бали
3. Лабораторні роботи (4 робіт) : РН 2.1-2.,4.1 – 15 балів / 9 балів
4. Підготовка рефератів: РН 2.1 – 5 балів / 3 бали

- підсумкове оцінювання у формі заліку.

Залік проводиться в письмовій формі. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом за складання заліку дорівнює 40. Для отримання заліку оцінка за залік не може бути меншою 24 балів. Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 бали. Студент допускається до заліку за умови виконання всіх передбачених планом лабораторних робіт та написання відповідної якості рефератів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій. Захист звітів лабораторних робіт та доповіді по рефератам проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	С/Р
<i>Змістовий модуль 1. Фізика рентгенівського випромінювання</i>				
1	Вступ			
2	Тема 1. Гальмівні спектри X-променів Основні закономірності гальмівних спектрів X-променів. Фізична природа короткохвильової границі. Вплив режиму роботи рентгенівської трубки на характеристики спектру.	2		2
3	Тема 2. Емісійні характеристичні спектри X-променів. Основні закономірності емісійних характеристичних спектрів X-променів. Спектральні серії. Структура K-серії XC. Закон Мозлі.	2		2
4	Тема 3. Джерела рентгенівського випромінювання Джерела рентгенівського випромінювання. Будова та принцип роботи рентгенівських трубок, їх номенклатура. Вибір оптимального режиму роботи рентгенівської трубки. Синхротронне випромінювання та його особливості. Загальна характеристика провідних європейських синхротронних центрів.	2		2
5	Тема 4. Механізми ослаблення X-променів Взаємодія рентгенівського випромінювання з речовиною. Механізми ослаблення X-променів. Істинне (фотоелектричне) поглинання. Лінійний та масовий коефіцієнти поглинання. Край поглинання та його фізична природа. Флуоресцентні та абсорбційні характеристичні спектри. Селективно поглинаючі фільтри рентгенівського випромінювання.	2		2
6	Тема 5. Методи реєстрації X-променів Способи реєстрації рентгенівських променів. Принцип роботи детекторів рентгенівського випромінювання. Типи та характеристики детекторів.	2		4
7	Тема 6. Основи рентгенівської дефектоскопії. Рентгенівська дефектоскопія: її фізичні засади та використання в медицині, науці та техніці.	2		4
8	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1		2
<i>Змістовий модуль 2. Кінематична теорія розсіювання X-променів та методи рентгеноструктурного дослідження полікристалів</i>				
9	ТЕМА 7. Розсіювання X-випромінювання вільним електроном. Розсіювання рентгенівського випромінювання вільним електроном. Множник Томсона та поляризаційний множник. Індикатриса розсіювання при різній поляризації первинного пучка. Переріз розсіювання.	2		4
10	Тема 8. Когерентне розсіювання X-випромінювання атомом. Когерентне розсіювання рентгенівського випромінювання атомом. Атомна амплітуда розсіювання та її зв'язок з електронною густиною. Атомний множник. Дисперсійні поправки до атомного множника.	2		4
11	ТЕМА 9. Формування дифракційних максимумів тривимірним періодичним середовищем. Розсіювання рентгенівського випромінювання ідеальним кристалом малого розміру. Інтерференційна функція Лауе та її аналіз Головні та побічні максимуми. Ширина головних максимумів. Рівняння Лауе. Формула Вульфа-Брегга. Запис інтерференційної функції в оберненому просторі. Інтерференційне рівняння та його графічна інтерпретація. Побудова Евальда для різних методів зйомки (метод Лауе, метод обертання, метод Дебая-Шерера). Зв'язок форми та розмірів вузла оберненої ґратки з формою та розмірами кристалу.	3		4
12	ТЕМА 10. Розсіювання X-променів складними ґратками. Розсіювання рентгенівських променів непримітивною елементарною коміркою. Структурна амплітуда та структурний множник. Розрахунок	3		4

	структурного множника для упорядкованих структур. Правила погасання. Псевдопогасання Множник повторюваності			
13	ТЕМА 11. <i>Вплив теплових коливань атомів та дефектів на інтенсивність дифракційних максимумів.</i> 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 дифракційних максимумів. Статичний фактор Дебая-Валлера. Дифузне розсіювання Х-випромінювання на дефектах кристалічної структури .	3		4
14	ТЕМА 12. <i>Інтерпретація порошкових рентгенограм кристалів кубічної, тетрагональної та гексагональної сингоній.</i> Інтерпретація порошкових рентгенограм, отриманих від кристалів, що належать до кубічної сингонії. Індексуння рентгенівських дифракційних спектрів полікристалічних речовин тетрагональної та гексагональної сингонії.	3		5
15	<i>Модульна контрольна робота 2</i>	1		2
Перелік лабораторних робіт				
	Робота 1. Техніка безпеки при роботі з джерелами іонізаційного випромінювання		2	
	Робота 2. Будова, параметри та режими роботи рентгенівських трубок		2	
	Робота 3. Ознайомлення з будовою та роботою рентгенівського дифрактометра ДРОН-4.		2	
	Робота 4. Визначення коефіцієнту поглинання фольг та підбір селективно поглинаючого фільтру		4	
	Робота 5. Одержання та обробка дифрактограм кубічних кристалів		4	
	Консультація	1		
	ВСЬОГО	30	14	45

Загальний обсяг **90 год.**¹, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Лабораторні – **14 год.**

Консультації – **1 год.**

Самостійна робота - **45 год.**

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

9. 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.: Metallurgia.- 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.: Metallurgia.-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. Семенько. 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., Семенько 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.: Metallurgia.- 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.: Metallurgia.- 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.